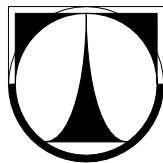


**TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI**  
Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií



## DIPLOMOVÁ PRÁCE

Liberec 2012

**Ladislav Neuman**

---

**TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI**  
Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: N2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 1802T007 – Informační technologie

**Zpracování výsledků simulace proudění a  
transportu za účelem vyhledání transportních  
cest migrace**

**Processing of flow and transport simulation  
results in order to search out migration paths**

**Diplomová práce**

Autor:

**Bc. Ladislav Neuman**

Vedoucí práce:

doc. Ing. Královcová Jiřina, Ph.D.

**V Liberci 18. 5. 2012**

Originál zadání práce.

### **Prohlášení**

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval(a) samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum 18.5.2012

Podpis



## **Poděkování**

Zde bych chtěl poděkovat svým rodičům a blízkým za podporu během celého studia. Dále vedoucí mé práce doc. Jiřině Královcové, která se mnou měla nekonečnou trpělivost, vedla mne a po celou dobu směřovala cennými radami a připomínkami při zpracování diplomové práce.

## **Abstrakt**

Předmětem práce bylo vytvořit softwarový nástroj, který bude umožňovat sledování hlavních transportních cest migrace, za použití výstupních dat simulačního softwaru Flow123D. Nejprve byla provedena analýza problematiky s ohledem na účelové zpracování dostupných dat a takto získané poznatky následně využity při návrhu požadované aplikace umožňující výpočet transportních cest, vzhledem k předem zadaným požadavkům.

V první části diplomové práce jsou popsány dostupné informace, Flow123D a jeho datové soubory, postup určení směru migrace a aproximace migrační cesty. Další část popisuje postup návrhu aplikace, vnitřní strukturu, možnosti nastavení výpočtu, vlastní výpočet transportní cesty a grafické uživatelské prostředí. Na závěr jsou na několika modelových úlohách a jedné reálné úloze prezentovány výsledky vytvořené pomocí navržené aplikace.

## **Klíčová slova**

Flow123D, proudění, transport, migrace, C#, .NET Framework

## **Abstract**

The purpose of this thesis was to create a software tool that will enable monitoring of the major migration ways of transport, using the output data of simulation software Flow123D. At first an analysis of issues with regard to the purpose of processing the available data and the findings obtained information subsequently used to design an application that allows calculation of the required transport ways due to the pre-specified requirements.

The first part of the thesis describes the available information Flow123D and its data files, the procedure to determine the direction of migration and migration routes of approximation. Next section describes how the design of the application, internal structure, calculation options, transport ways calculation and graphical user interface. At the end, for several model problems and one real role presents the results generated by the proposed application.

## **Keywords**

Flow123D, flow, transport, migration, C#, .NET Framework

# Obsah

Prohlášení .....	3
Poděkování.....	4
Abstrakt .....	5
Seznam obrázků .....	8
Úvod .....	10
1 Rozbor problému.....	12
1.1 Flow123D software .....	13
1.2 Flow123D a jeho datové soubory.....	15
1.2.1 Formáty souborů .....	17
1.3 Postup určení směru migrace .....	19
1.4 Aproximace migrační cesty.....	22
1.5 Míra ředění .....	25
1.6 Doba transportu .....	26
2 Návrh aplikace .....	28
2.1 Vnitřní struktura aplikace.....	28
2.2 Výpočet transportních cest.....	29
2.3 Uživatelské prostředí aplikace.....	30
3 Testovací úlohy .....	35
3.1 Varianty zobrazení výsledků.....	35
3.2 Praktická ukázka nasazení.....	41
3.3 Reálná úloha Melechovského masivu.....	43
Závěr.....	48
Literatura.....	50
Příloha A     Obsah přiloženého disku .....	51

## Seznam obrázků

Obr. č. 1 Pohled v kontextu všech souborů [1].....	16
Obr. č. 2 Požadované soubory Flow123D [1] .....	16
Obr. č. 3 Možnosti zobrazení MSH formátu .....	18
Obr. č. 4 Cesta šíření vhodná pro aproximaci.....	19
Obr. č. 5 Kompatibilní a nekompatibilní sousednost.....	20
Obr. č. 6 Sousednost elementů různých dimenzí.....	20
Obr. č. 7 Sousednost elementů stejné dimenze.....	20
Obr. č. 8 Kombinovaná situace sousednosti.....	21
Obr. č. 9 Coonsova kubika třetího řádu.....	24
Obr. č. 10 B-spline z pěti vrcholů .....	24
Obr. č. 11 B-Spline s násobností krajních vrcholů polygonu .....	25
Obr. č. 12 Ilustrace obecné situace na případě 2D elementu.....	26
Obr. č. 13 Diagram a ukázka vnitřní struktury některých tříd.....	28
Obr. č. 14 Hlavní pracovní formulář aplikace .....	30
Obr. č. 15 Formulář nastavení zdrojového členu .....	31
Obr. č. 16 Formulář výběru elementů při zadání souřadnicbodu.....	32
Obr. č. 17 Formulář správy seznamu elementů ke zpracování.....	32
Obr. č. 18 Nastavení aplikace a výpočtů.....	33
Obr. č. 19 Globální pohled na 2D úlohu s využitím aproximace .....	36
Obr. č. 20 Bližší pohled na 2D úlohu s využitím aproximace .....	36
Obr. č. 21 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí úseček.....	37
Obr. č. 22 Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí úseček.....	38
Obr. č. 23 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazením pomocí vektoru přetoku.....	38
Obr. č. 24 Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vektoru přetoku.....	39
Obr. č. 25 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vekt. rychlosti proudění..	40

Obr. č. 26 Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vektoru rychlosti prodění ....	40
Obr. č. 27 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení všech směrů migrace.....	41
Obr. č. 28 2D síť s oblastí kontaminace a zobrazenými preferenčními cestami .....	42
Obr. č. 29 2D síť s oblastí kontaminace a zobrazenými všemi cestami migrace.....	42
Obr. č. 30 Geometrie oblasti Melechov masivu s vyznačeným zdrojem kontaminantu .	43
Obr. č. 31 Globální pohled na první variantu Melechovského masivu .....	44
Obr. č. 32 První detail na první úlohu Melechovského masivu.....	44
Obr. č. 33 Druhý detail na první úlohu Melechovského masivu .....	45
Obr. č. 34 Třetí detail na úlohu Melechovského masivu.....	45
Obr. č. 35 Migrační cesta z uvažovaného zdroje kontaminantu pro element 12273 .....	46
Obr. č. 36 Půdorys úplné cesty šíření z uvažovaného zdroje kontaminantu .....	47
Obr. č. 37 Bokorys úplné transportní cesty z uvažovaného zdroje kontaminantu.....	47

# Úvod

S rozvojem výpočetní techniky a neustálým zvětšováním a zrychlováním toku zpracovávaných informací dochází i ke stále častějšímu užití softwarových nástrojů v oblastech, které dosud nepatřili mezi dominantní prostor jejich nasazení. Současně s rozvojem výpočetní techniky dochází zároveň k vývoji v oblasti návrhu a vývoje aplikačního softwaru a tím k nasazování jak jednoúčelových aplikací prováděných nad velkým množstvím dat, tak i heterogenních systémů plnících celou škálu zadaných úkolů. K rozvoji výpočetní techniky nedocházelo pouze v jednom segmentu, ale komplexně ve všech sférách nasazení. Výjimkou není ani stále častější využívání a dynamický rozvoj softwaru v přípravných fázích, případně ve fázi dalšího zpracování výsledných dat, kde je například díky různým grafickým knihovnám, nebo dalšímu přidruženému softwaru, možné po úpravách data vizualizovat. Mnohdy takto uživatel dostane komplexnější přehled o situaci a dokáže se rychleji adaptovat na danou situaci. S rychlým vývojem informačních a softwarových nástrojů tak došlo k rychlému rozvoji podpůrných aplikací. Tyto aplikace tvoří důležitou podporu ve všech aplikačních sférách a je jich dnes využíváno téměř všude.

Pro řešení spojitých problémů se zpravidla využívá diskretizace. To znamená, že je spojitě kontinuum nahrazeno systémem diskrétních bodů, ve kterých se následně soustředí fyzikální parametry popisující stav nebo vlastnosti daného místa. Princip diskretizace a dalších odvozených metod je znám už poměrně dlouho, k rozsáhlejšímu nasazení došlo až s prudkým vývojem a nasazováním výpočetní techniky. Diskretizace využívá i specializovaný simulační software Flow123D.

Flow123D je simulační software sloužící k simulaci ustáleného proudění podzemních vod a transportu rozpuštěných látek v saturovaném horninovém prostředí. Program je vyvíjen na Ústavu nových technologií a aplikované informatiky Technické univerzity v Liberci, je aktuálně vyvíjen a šířen pod GNU GPL v3 licenci. Bližší informace o aplikaci Flow123D jsou uvedeny v dokumentaci [1]. Při realizaci simulací ve Flow123D jsou využívány další podpůrné programy například aplikace NGH, sloužící ke generování topologie simulačních sítí, nebo GMSH používaný pro tvorbu sítí a grafické zobrazení výsledků simulací.

Simulační software Flow123D poskytuje pro zadanou oblast hodnoty simulovaných veličin (tlak, rychlost proudění) popřípadě jejich časové průběhy (koncentrace) v jednotlivých elementech výpočetní sítě. Předmětem této diplomové práce bylo implementovat počítačovou aplikaci, která zpracuje výsledky konkrétní simulace proudění nebo transportu ve Flow123D a vyhledá transportní cesty, případně další globální charakteristiky transportu dle zadaných parametrů.

Vlastní text diplomové práce je členěn, mimo úvodu a závěru, do tří částí. Část „Rozbor problému“ popisuje dostupné informace, Flow123D a jeho datové soubory, postup určení směru migrace a aproximaci migrační cesty. Další část popisuje postup návrhu aplikace, vnitřní strukturu, možnosti nastavení výpočtu, vlastní výpočet transportní cesty a grafické uživatelské prostředí. Na závěr jsou na několika modelových úlohách a jedné reálné úloze prezentovány výsledky vytvořené pomocí navržené aplikace.



# 1 Rozbor problému

Simulační software Flow123D poskytuje výsledky výpočtu proudění a transportu v několika formách. Vždy však jako hodnoty simulovaných veličin, případně jejich časové průběhy, na elementech pro celou výpočetní síť najednou. Standardní výsledky Flow123D tedy neposkytují informaci o konkrétní transportní cestě nebo cestách migrace pouze pro konkrétní výchozí zdrojový člen. Předmětem této práce se proto stalo navrhnout počítačovou aplikaci, která zpracuje výsledky poskytnuté simulačním softwarem Flow123D a vyhledá transportní cesty podle zadaných parametrů.

Z výše uvedených informací bylo možné provést základní definice problémů pro řešení. Mezi ty patří například, jakým způsobem bude definován zdrojový člen, jaké další parametry transportní cesty bude možné vyhledat nebo vypočítat? Otázky pro řešení vycházejí také ze samotného smyslu identifikace směru migrace od zdrojového členu. Důvodem může být například poskytnutí informace o šíření kontaminantu námi zadaným prostorem a jeho analýza z pohledu času a zasaženého prostoru. Další informace, která může být z hlediska vyhodnocení zajímavá, je informace o hlavním směru šíření z elementu, který pro nás představuje zdroj, nebo z jakého prostoru bude námi zájmový element ovlivněn. Konkrétně se může jednat o zdroj kontaminace v podobě například chemické továrny, šířící do okolí nebezpečné látky. Zde bude pro vyhodnocení zajímavá informace o směru šíření kontaminantu do zájmové oblasti, a zda se z různých zdrojových elementů mění směr šíření. Na základě získaných informací je dále možné analýzou zjistit, jestli se v oblasti nachází transportní kanály šířící kontaminant jedním, případně více směry, nebo například dochází k šíření do všech směrů.

Dalším vhodným příkladem může být informace, z jakého směru bude ovlivněn zdroj pitné vody pro danou oblast. V tomto případě by pro vyhodnocení nebyla zajímavá informace pouze o hlavním směru, ale o celém prostoru, který zdroj pitné vody ovlivňuje. Další informace o konkrétní cestě migrace, které mohou být přínosné pro další fáze zpracování je například čas, který látka bude potřebovat k přemístění ze zdrojového místa k cílovému, nebo informace o míře ředění zájmové látky.

## 1.1 Flow123D software

V první fázi řešení práce bylo nutné se seznámit s Flow123D, jeho základním účelem, principy, způsobem práce a jednotlivými kroky realizace konkrétní úlohy. Tato fáze rovněž zahrnovala seznámení se vstupy, výstupy, jejich strukturou a praktickým použitím.

Modelovací nástroj Flow123D je software pro simulaci podzemního proudění a transportu ve vodě rozpuštěných látek v saturovaném prostředí rozpukané horniny. Flow123D lze použít například při plánování hlubinného ukládání nebo sanačních zásahů, či pro výpočet rozvoje znečištění ze zdroje v horninovém prostředí.

Geometrie oblasti může obsahovat 3D prvky (objemy), 2D prvky (pukliny), 1D liniové prvky (kanály) a je možné modelovat různé typy spojení mezi prvky těchto dimenzí. Výpočetní síť je následně složena z úseček, trojúhelníků a čtyřstěnů. Pro definování výpočetní úlohy a uložení výsledků je využito několik formátů souborů v textovém nebo binárním formátu. Proudění je ve Flow123D považováno za nasycené a Darcyho, transportní model zahrnuje různé typy sorpce a dvojí porózy. Pro proudění je používána smíšená hybridní metoda konečných prvků (MH MKP). Transport je řešen metodou rozkladu operátoru, konvekce je řešena metodou konečných objemů (MKO) a sorpce je počítána numericky [7]. Flow123D je implementován v C/C++ a pro řešení generované soustavy lineárních algebraických rovnic používá externí řešiče (například PETSC, GM6). Jak proudění, tak transport může být řešen paralelně pomocí MPI knihovny. V další fázi řešení bylo nutné posoudit využitelnost výsledků transportu a proudění.

Transport představuje proces, při němž se mění výsledné hodnoty zájmové veličiny v určitém prostoru a času. Ačkoliv je sledovanou veličinou, v tomto případě koncentrace látky, může se jednat i o energii nebo hybnost. Speciálním případem transportu je difuze, neboli proces, při kterém v koncentračně nehomogenním systému dochází k samovolnému vyrovnání koncentrace zájmové látky. Jedná se o zjednodušenou definici, podrobnější informace je možné nalézt v [1] a [2]. Simulační software Flow123D využívá konvečně-difúzní (konvekce-difúze-absorpce-reakce) model transportu, který obecně zahrnuje časovou závislost.

Výsledkem simulace transportu je rozložení zájmové látky v prostoru a daném časovém úseku (definovaných krocích), pro které byla provedena konkrétní simulace.

Ve vyhledané cestě, při využití výsledků transportu, by byla zahrnuta pouze oblast, které by kontaminant dosáhl v daném časovém intervalu, a nebyla by, jak je vhodné, zahrnuta i zbylá oblast. Zjednodušeně si je možné danou situaci představit takto. Simulovanou oblast definujeme jako úsečku mezi body A a B, kterou je možné rozčlenit na 10 částí (časových kroků) a šíření kontaminantu směrem od bodu A do bodu B. Uvažujeme konstantní šíření zájmové látky mezi těmito body a zájmový počáteční bod P leží uprostřed úsečky AB. Pokud provedeme simulaci po dobu 10 a více kroků z bodu A, bude zahrnuta celá simulovaná oblast a bude možné nalézt celou migrační cestu z bodu P. Provedeme-li simulaci pouze po dobu 7 časových kroků, nedojde k zahrnutí posledních 3 částí, a tudíž ve výsledku nebude zahrnuta celá transportní cesta. Migrační cesta by obsahovala pouze 2 úseky, směrem k bodu B. Ačkoliv poskytují výsledky transportu globální pohled na danou úlohu v definovaném časovém úseku, z výše uvedeného zjištění plyne, že nejsou k vyhledání transportních cest migrace vhodné.

Proudění, respektive v tomto případě ustálené proudění vodného roztoku v plně saturovaném prostředí je možné popsat pomocí dvou diferenciálních rovnic. Jedná se o pohybovou rovnici neboli Darcyho zákon a rovnici bilance. Darcyho proudění pro případ ustáleného proudění popíšeme vztahem:

$$\mathbf{u} = -K \nabla \Phi, \quad (1)$$

kde  $\mathbf{u}$  [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ] představuje takzvanou darcyovskou rychlost proudění,  $K$  [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ] je hydraulická vodivost a  $\Phi$  [m] je piezometrická výška, definovaná takto:

$$\Phi = \frac{p}{\rho g} + z \text{ [m]}, \quad (2)$$

kde  $z$  reprezentuje svislou souřadnici.  $p$  zde představuje tlak [Pa],  $\rho$  hustotu kapaliny a  $g$  tíhové zrychlení.

Rovnici kontinuity je možné zjednodušeně popsat jako zákon zachování nějaké veličiny pomocí jejího prostoročasového rozložení. V idealizovaném případě je možné zapsat rovnici kontinuity pro kontrolní objem  $V$  ve tvaru:

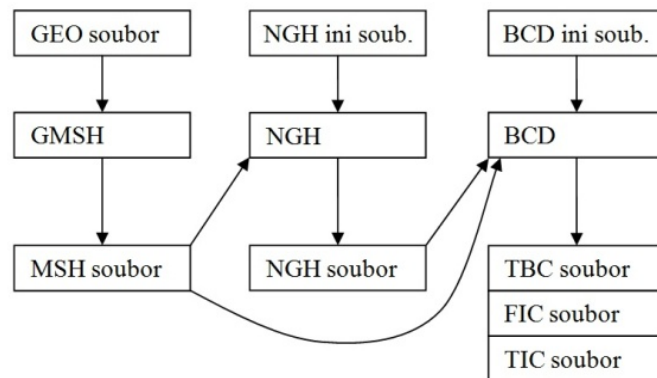
$$M_a = M_q - M_o, \quad (3)$$

kde  $\mathbf{M}_a$  je přírůstek hmoty v kontrolním objemu,  $\mathbf{M}_q$  je hmotnost vody přitékající a  $\mathbf{M}_o$  hmotnost vody odtékající přes hranice kontrolního objemu. Přesnější rozbor problematiky je možné nalézt v [2]. Simulační software Flow123D poskytuje výsledky výpočtu ustáleného proudění ve formě vektoru rychlosti, tlaku na elementu, tlaku na stěnách a přetoků přes stěny pro každý element výpočetní sítě. Ke zpracování při výpočtu transportní cesty migrace je vhodné použít například přetoky přes stěny, nebo vektor proudění. Z výše uvedených informací je patrné, že výsledky výpočtu ustálené proudění je ke zpracování možné použít a v práci je rozvedeno použití přetoků přes stěny.

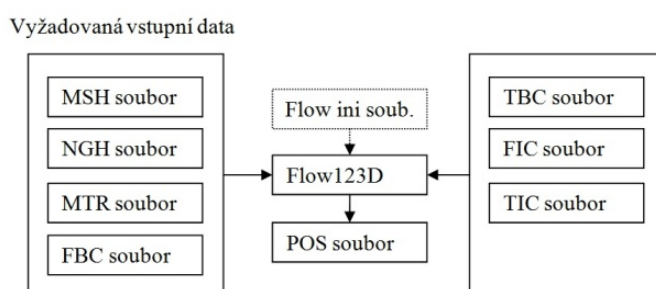
Cestu migrace budeme v tomto případě popisovat jako uspořádanou sekvenci bodů – v našem případě těžišť elementů. Pořadí elementů je u rozsáhlejších cest zahrnujících více směrů šíření závislé na metodice vyhledávání. Z takto vzniklé řady však lze následně získat další doplňující informace. Těmito informacemi může být například transportní čas po zjištění cestě, nebo informace o ředění. Takto vzniklá data je možné reprezentovat několika způsoby. Vždy je nutné zvolit vhodný způsob prezentace výsledků vzhledem k použití. U dříve jmenovaného času transportu, není nutné uživateli poskytovat data o zahrnutých elementech a naopak, pokud si to uživatel přímo nevyžádá.

## 1.2 Flow123D a jeho datové soubory

Pro definování úlohy a uložení výsledků využívá Flow123D několik typů formátů souborů v textové nebo binární formě. V práci jsou uvažovány pouze soubory v textovém tvaru, využívá se zde jejich čitelnosti pro ruční zpracování a ověřování výsledků. Struktura vstupně výstupních souborů a jejich vztahy vzhledem k dalším podpůrným aplikacím jsou znázorněny na Obr. č. 1 a 2.



Obr. č. 1 Pohled v kontextu všech souborů [1]



Obr. č. 2 Požadované soubory Flow123D [1]

Pro výpočet proudění vyžaduje Flow123D čtyři typy souborů. Jsou to tyto soubory: soubor sítě s běžně používanou příponou msh, soubor topologie sítě (obsahuje sousednosti elementů) s běžně používanou příponou ngh. Soubor fyzikálních vlastností (běžně používaná přípona mtr) a soubor okrajových podmínek proudění obvykle s příponou bcd. Na výstupu potom program ukládá výsledky do souboru čitelného v GMSH softwaru, nebo do obecného textového souboru.

Při definování úlohy je nejdříve vytvořena geometrie oblasti. K tomu se nejčastěji používá aplikace GMSH respektive její modul *geometry* a CAD rozhraní. Pomocí tohoto softwaru je následně také možné vygenerovat výpočetní síť a uložit ji do souboru typu MSH. Na výpočetní síti jsou následně prováděny simulace. Flow123D v současné době podporuje výpočetní síť složenou ze tří typů elementů a to úsečka, trojúhelník a čtyřstěn. Pokud jsou detekovány jiné typy elementů, dojde k přerušení simulace. S využitím dalších podpůrných aplikací je následně možné vytvořit a případně upravit další požadované soubory a to MTR, NGH i FBC. Jednotlivé formáty souborů jsou popsány v manuálu Flow123D [1] nebo softwaru GMSH [3].

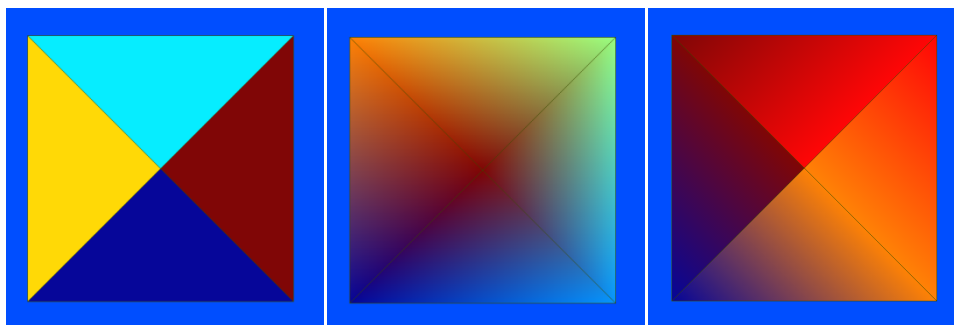
Obecný textový soubor s výsledky výpočtu proudění obsahuje tyto informace: index elementu, číslo elementu, počet stěn, tlak v těžišti, tlaky na stěnách, přetoky přes stěny a rychlost ustáleného proudění v těžišti. Bližší informace o využití souborů v implementované aplikaci je možné nalézt v kapitole 1.3 Postup určení směru migrace.

Výsledky výpočtu transportu a proudění simulačního softwaru Flow123D mohou být obecně poskytnuty dvěma způsoby. První způsob jsou přímo vypočtená data, v neupravené formě. Tato data poskytují přesné informace o provedených výpočtech, ale v některých případech se může jednat o ne příliš přehledná data. Druhým způsobem jsou přepočtená data ve formě například vektorů, určená v tomto případě, ke grafické prezentaci výsledků. Tyto dva přístup reprezentují u simulačního softwaru Flow123D formáty MSH a POS případně obecný textový soubor u výsledků proudění.

### **1.2.1 Formáty souborů**

V současné době, je pro vizualizaci některých souborů, jak vstupních tak výstupních, využívaných simulačním softwarem Flow123D, používána aplikace GMSH. Proto bylo pro zachování jednotného přístupu rozhodnuto, o využití formátu POS nebo MSH, k zapsání nalezené migrační cesty, pomocí implementované aplikace, do souboru. Oba umožňují několik způsobů zobrazení a jsou podporovány výše zmíněnou aplikací GMSH. Tyto formáty jsou popsány v manuálu [3].

Formát MSH vychází z definování hodnot, jako doplňkové informace k výpočetní síti. Hodnoty jsou vázány na předem určený element nebo vrchol. Formát dává čtyři hlavní možnosti reprezentace získaných dat a to: skalární hodnota na elementu, hodnoty na jednotlivých vrcholech daného elementu, které jsou interpolovány a zobrazeny jako spojitě vyplněný element. Dále definování daného vrcholu elementu rovněž s interpolací hodnot a jako poslední možnost nabízí definování vektoru z těžiště elementu. Možnosti zobrazení jsou znázorněny na následujících ilustracích ve stejném pořadí, jak byly jmenovány, mimo vektoru.



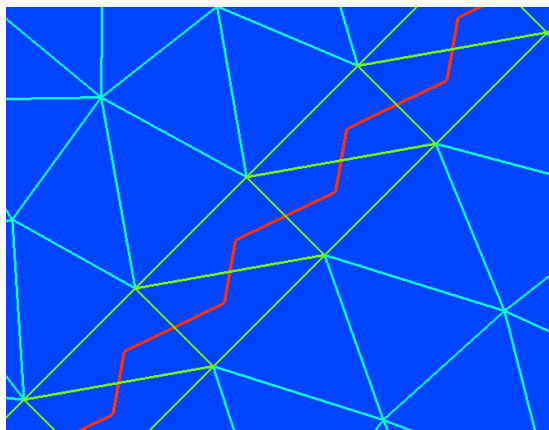
Obr. č. 3 Možnosti zobrazení MSH formátu

Pokud bychom chtěli definovat námi uvažovanou transportní cestu reprezentovanou těžišti elementů například jako úsečku, museli bychom definovat nové vrcholy a tím i narušit původní výpočetní síť.

Alternativou pro zobrazení výsledků je formát POS. Tento formát umožňuje zobrazení v několika variantách, oproti MSH nejsou vrcholy definovány předem, ale zadávají se souřadnice přímo při definování každého primitiva, což dovoluje prolínání elementů a jejich kombinování. Nevýhodou tohoto formátu je určitá duplicita, vznikající několikanásobným zápisem jednoho a toho samého vrcholu. Dále je tento formát obohacen o několik dalších zobrazovacích prvků. Vektor a přímka jsou zároveň nejvhodnějšími typy primitiv pro zobrazení směru a hodnoty. Aplikace GMSH následně u obou těchto formátů umožňuje různou reprezentaci vstupních dat a tím uživateli dovoluje přizpůsobit si zobrazení aktuálním požadavkům.

Pro porovnání potenciálu vzhledem k zobrazení transportní cesty migrace je nejprve nutné si transportní cestu definovat. Pod tímto pojmem je možné si představit jeden nebo více směrů šíření v požadovaném směru, za uživatelem zadaných podmínek. Může představovat například jediný směr, kterým se ze zdrojového místa přesouvá sledovaná látka, nebo více směrů, které průběžně končí na okraji simulovaného prostoru, nebo vznikají rozdělením směru do dvou a více větví. Získané informace zjištěné v navržené aplikaci mohou být prezentovány, stejně jako v předchozím případě, v několika formách. Forma výsledku závisí na způsobu použití získaných informací. Pokud budeme vyžadovat informace o jednotlivých elementech patřících do námi vyhovujících podmínek, bude postačovat jednoduchá forma textového souboru v námi definovaném tvaru. Pokud budeme vyžadovat sofistikovanější způsob prezentace, například spolu s některými dalšími daty, budeme odkázáni na složitější formu uložení

výsledků, případně další výpočty. Například vzhledem k rozčlenění oblasti do elementů jednotlivých typů, může vzniknout cesta šíření, která ač je ve výsledku jeden přímý směr, při zobrazení přes elementy se jeví, jako cesta měnící směr k elementům náležícím cestě migrace viz Obr. č. 4. Zde je vhodné využít aproximace a zmírnit tak vliv chyby dané zobrazováním cesty přes těžiště elementů. Červeně je vyznačena cesta migrace, žlutě výpočetní síť.



Obr. č. 4 Cesta šíření vhodná pro aproximaci

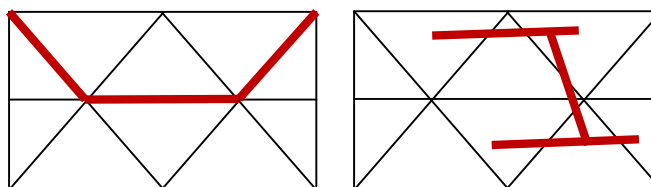
Ve fázi vývoje aplikace není vhodné definovat jediný způsob zobrazení. Ten by se mohl při testování a experimentování ukázat jako nevhodný. Z tohoto důvodu je vhodné implementovat více možností a nechat na uživateli, jakým způsobem si výsledky zobrazí. Jako vhodné způsoby se jeví vektory znázorňující směr přetoku, úsečky umožňující zobrazit vypočtenou trasu nebo pouze bod, reprezentující element. Pokud je využita aproximace, není výsledkem křivka ale sada vrcholů spojená úsečkami. Aplikace GMSH umožňuje zobrazit soubor POS spolu se souborem MSH, není tedy do souboru \*.pos nutné ukládat výpočetní síť v jakékoliv formě, pouze při současném zobrazení je nutné kombinovat správný soubor sítě s odpovídajícími výsledky.

### 1.3 Postup určení směru migrace

Pro řešení problému určení směru migrace použijeme přetoky přes stěny elementu, které jsou výsledkem simulace proudění. Postup vyhledávání směru migrace

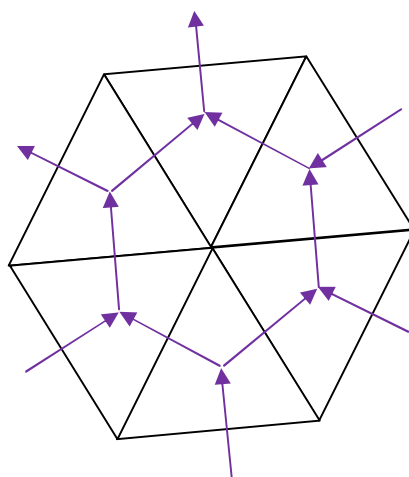


musí být nezávislý na typu zdrojového elementu. Elementy jsou v simulačním softwaru Flow123D myšleny 1D, 2D a 3D elementy zastoupené přímkou, trojúhelníkem a čtyřstěnem. V aplikaci je uvažováno pouze s kompatibilními sousednostmi. Rozdíl mezi kompatibilními a nekompatibilními sousednostmi je znázorněn na Obr. č. 5.

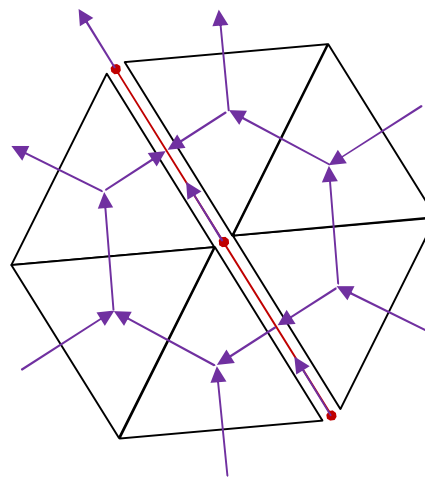


Obr. č. 5 Kompatibilní a nekompatibilní sousednost

Zjišťování sousedních elementů je závislé od typu sousednosti aktuálního a sousedících elementů. Mohou nastat dvě základní situace. První situace je sousednost elementů stejných dimenzí tj. například 2D-2D, tyto sousednosti jsou v souborech s topologií sítě označovány jako typ *11*. Druhou možností je situace kdy spolu sousedí elementy vyšší a nižší dimenze, například 1D-2D. Ty jsou označovány jako typ *20*. Vzorové situace jsou znázorněny na Obr. č. 6 a 7.



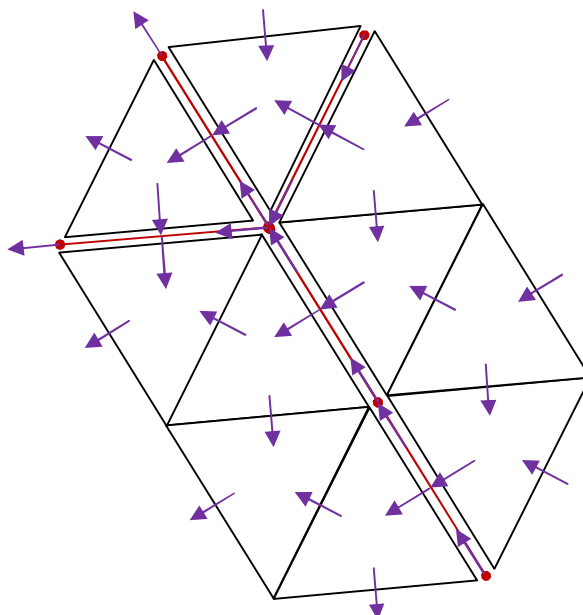
Obr. č. 7 Sousednost elementů stejné dimenze



Obr. č. 6 Sousednost elementů různých dimenzí

V návaznosti na tuto problematiku je nutné si uvědomit, jak může docházet k přetokům přes hranice jednotlivých elementů. Některé možné situace jsou vyobrazeny jako modré vektory také na Obr. č. 7 a 8. Analogicky lze uvažovat obdobné situace u kombinací 3D-3D elementů a 3D-2D elementů. O poznání komplikovanější situace

nastává například při vícenásobném napojování elementů nižšího řádu s elementy vyššího řádu. Tj. například při napojování puklin z více směrů, kdy dochází rozdělení přetoku mezi více elementů. Tato situace je znázorněna na Obr. č. 8



Obr. č. 8 Kombinovaná situace sousednosti

Na této situaci je ilustrováno, jakým způsobem může dojít k přetoku přes hranice ve směru k elementu vyšší či nižší dimenze, dále k rozdělení přetoku směrem od elementu stejného řádu z jiného směru. Všechny tyto situace je nutné do algoritmu zahrnout a případně i provádět kontrolu, zda souhlasí vtok a výtok z uzlu.

Vyhledávání transportní cesty je v aplikaci prováděno v několika krocích popsaných na algoritmu prohledávání stromu do hloubky. Každý uzel stromu reprezentuje navštívený element a je označen indexem daného elementu. Zásobník i seznam navštívených elementů obsahuje pouze indexy reprezentující jednotlivé elementy.

#### 1. Počáteční nastavení

- Vynulování seznamu navštívených elementů
- Zásobník je na začátku prázdný
- Nastavení počátečního elementu jako aktuálního elementu ke zpracování a vytvoření uzlu stromu s odpovídajícím indexem

## 2. Krok navštívení aktuálního elementu

- Najde sousedy aktuálního elementu a zredukuje je podle zadaných parametrů přetoku, zároveň pro ně vytvoří uzly
- Setřídí sousedy podle hodnoty přetoku
- Přiřadí sousedy aktuálnímu uzlu
- Pokud nebyli jednotliví sousedé ještě zpracováni, jsou jejich indexy přidáni do zásobníku a tím označeni ke zpracování

## 3. Odebrání uzlu ze zásobníku

- Pokud je zásobník prázdný, je algoritmus ukončen. Všechny elementy náležící cestě migrace byly nalezeny
- Ze zásobníku je odebrán index elementu, a pokud je element ještě nenavštívený, je nastaven jako aktuálně ke zpracování a zároveň přidán do seznamu navštívených elementů. Algoritmus přejde znovu na začátek bodu 2

Výsledkem aplikováním výše uvedeného postupu dosáhneme vytvoření stromu, kde každý uzel reprezentuje navštívený element. Takto vzniklý strom může být následně dále zpracován.

# 1.4 Aproximace migrační cesty

Pokud bychom vyhledanou cestu zobrazili jako spojnicí těžišť vyhledaných elementů, bude výsledné zobrazení nepřirozené (lomená čára). Takto získaný výsledek je významně zatížen strukturou použité sítě. Proto je po vyhledání elementů provedena aproximace migrační cesty.

Pro aproximaci je využito Coonsovy kubiky třetího řádu, respektive takzvaného uniformního kubického B-spline, který vzniká navázáním Coonsových kubik. Coonsovy kubiky vycházejí stejně jako Bezierova kubika ze zadání čtyřmi body a to  $P_0$  až  $P_3$ . Výpočet vychází ze vztahu:

$$P_{(t)} = \frac{1}{6} [P_0 C_0(t) + P_1 C_1(t) + P_2 C_2(t) + P_3 C_3(t)] = \frac{1}{6} \sum_{i=0}^3 P_i C_i(t), \quad (4)$$

kde  $C_0$  až  $C_3$  tvoří kubické polynomy tvaru:

$$\begin{aligned}C_0(t) &= (1 - t)^3 \\C_1(t) &= 3t^3 - 6t^2 + 4 \\C_2(t) &= -3t^3 + 3t^2 + 3t + 1 \\C_3(t) &= t^3\end{aligned}\tag{5}$$

kde  $t \in \langle 0,1 \rangle$ . Ze vztahu (4) a (5) v maticovém zápisu dostaneme:

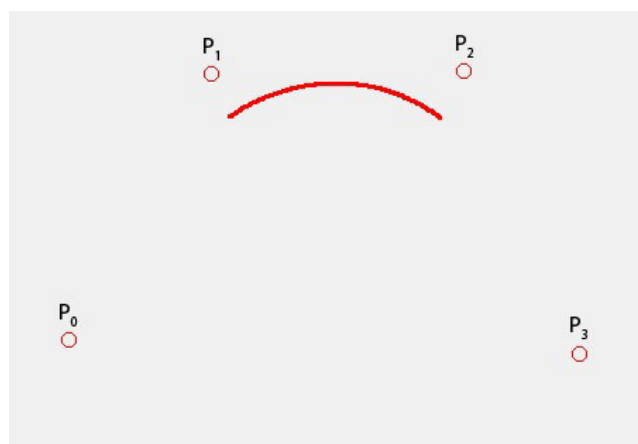
$$Q(t) = \frac{1}{6} T \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_0 \\ P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{bmatrix}\tag{6}$$

$$T = [t^3 \quad t^2 \quad t^1 \quad 1]\tag{7}$$

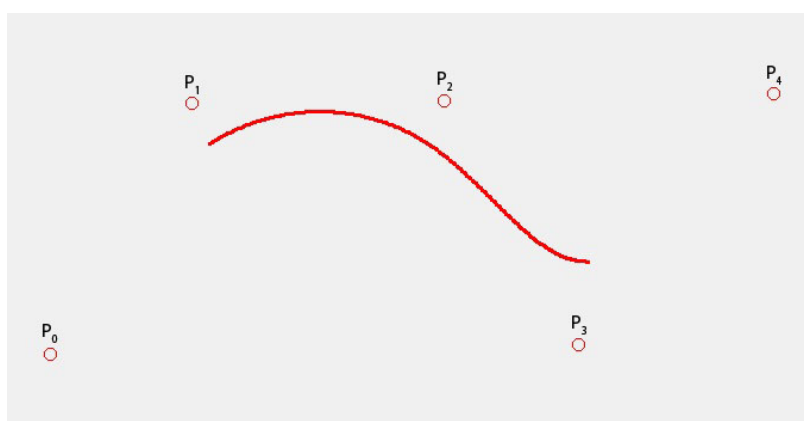
Dosazením vztahu (6) a (7) získáme:

$$Q(t) = [t^3 \quad t^2 \quad t^1 \quad 1] \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_0 \\ P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{bmatrix}\tag{8}$$

Vztah (8) je následně postupně aplikován na jednotlivé segmenty vypočtených preferenčních cest, kde První segment ( $Q_1(t)$ ) je vždy tvořen vrcholy  $P_0$  až  $P_3$  a následující segment ( $Q_2(t)$ ) vrcholy  $P_1$  až  $P_4$ , obecně  $P_{n-3}$  až  $P_n$ . Křivky vzniklé aplikováním výše uvedeného postupu jsou znázorněny na Obr. č. 9 a č. 10.

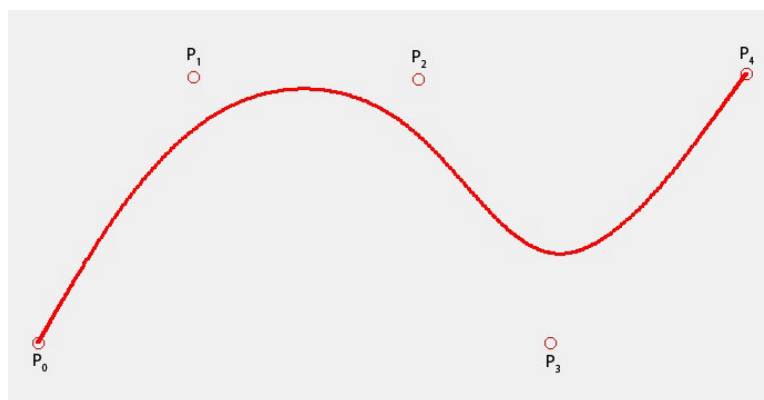


Obr. č. 9 Coonsova kubika třetího řádu



Obr. č. 10 B-spline z pěti vrcholů

Coonsonova kubika obecně neprochází krajními body svého řídícího polygonu. K ovlivnění pozice krajních bodů křivek existují dvě metody, prvním z nich je využití pseudo-vrcholů, druhý je násobnost vrcholů. Definováním vícenásobného řídícího vrcholu, se vzniklá křivka buď přibližuje k danému vrcholu, nebo tímto vrcholem prochází. Pokud je vrchol  $n$ -násobný, kde  $n$  označuje stupeň aproximační křivky, křivka daným vrcholem přímo prochází. Druhým způsobem jsou pseudo-vrcholy, kde přidáním vrcholu  $P_{-1}$  a  $P_{n+1}$  ovlivníme danou křivku. Pseudo-vrcholy nejsou zobrazeny a slouží jen pro ovlivnění krajních bodů křivky. Křivka vzniklá složením dvou Coonsových kubik a násobností krajních bodů je vyobrazena na Obr. č. 11.



Obr. č. 11 B-Spline s násobností krajních vrcholů polygonu

Aplikace využívá pro zobrazení celé migrační cesty včetně krajních bodů výše popsaný postup vícenásobných vrcholů. Vzhledem k šíři této problematiky, je možné bližší informace nalézt například zde [5] a [6].

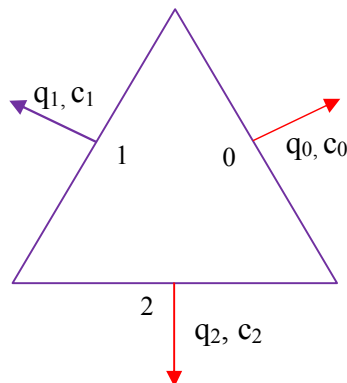
Spolu s aproximací migrační cesty je v tomto případě spojen problematika interpolace hodnot přetoků migrační cesty. Zde je zvolena metoda průměrů hodnot přetoku odpovídající hodnotám v bodech  $P_1$  a  $P_2$ . V krajních bodech je využito váženého průměru.

## 1.5 Míra ředění

Máme-li určenou transportní cestu jako uspořádanou sadu elementů včetně hodnot parametrů proudění vypočtených na jednotlivých elementech, lze na základě těchto dat stanovit jakousi míru ředění, ke kterému podél této transportní cesty dochází. Míru ředění vztáhneme k hodnotě 1 reprezentující koncentraci, respektive vyjadřující míru ředění na počátečním elementu transportní cesty. Pro výpočet míry ředění lze pak využít hodnoty přetoků  $q$  přes stěny jednotlivých elementů. Přetok přes stěnu představuje objemový tok (v jednotkách  $\text{m}^3/\text{s}$ , respektive obecně v objemových jednotkách za čas) ve směru vnější normály. Kladné hodnoty vyjadřují tok z elementu, záporné hodnoty pak přítoky do elementu.

Výpočet míry ředění pro jednotlivé elementy podél transportní cesty vychází z požadavku zachování bilance vody a bilance rozpuštěné látky a z předpokladu

rovnoměrného míchání koncentrací na každém elementu. Obr. č. 12 ilustruje obecnou situaci v tomto případě na 2D elementu. Pro libovolný element potom  $\sum_i c_i q_i = 0$ .



Obr. č. 12 Ilustrace obecné situace na případě 2D elementu.

Ve zjednodušeném schématu výpočtu míry ředění jsou předpokládány nenulové koncentrace pouze na elementech transportní cesty, výsledkem je informace o tom, jak daná transportní cesta přispívá k ředění kontaminace. Takto vyhodnocený parametr míry ředění nemůže nahradit a nenahrazuje globální výpočet transportu, nicméně může poskytnout užitečnou doplňkovou informaci pro jistý vyhledaný hlavní směr šíření kontaminace.

## 1.6 Doba transportu

Obdobně jako tomu bylo v případě míry ředění, pokud máme určenou transportní cestu jako uspořádanou sadu elementů včetně hodnot parametrů proudění vypočtených na jednotlivých elementech, můžeme z těchto dat určit, jak dlouho by mohlo trvat, než se látka z počátečního elementu transportní cesty dostane do jejího koncového elementu. Tento vyhodnocený parametr označíme jako dobu transportu podél transportní cesty.

Transportní cesta je dána sadou elementů. Pokud zavedeme transportní dobu  $t_e$  na jednom elementu  $e$  jako

$$t_e = v_e d_e \quad (9)$$

kde  $d_e$  je délka transportní cesty na elementu  $e$ , a  $v_e$  rychlost na tomto elementu. Potom, celkový transportní čas  $t$  podél cesty je obecně součtem transportních časů na jednotlivých elementech

$$t = \sum_e v_e d_e \quad (10)$$

Takto vyhodnocený parametr, obdobně jako parametr míry ředění, může poskytnout užitečnou doplňkovou informaci pro vyhledaný hlavní směr šíření kontaminace využitelný například ve fázi přípravy výpočty transportu například pro stanovení minimální celkové doby pro transportní výpočet.

**Poznámka:** Oba uvedené postupy stanovení míry ředění a doby transportu po konkrétní transportní cestu vychází z vyhledané transportní cesty. Při jejím vyhledání se využívají převážně přetoky mezi elementy, jejichž směr je ovlivněn použitou výpočetní sítí. Vyhledaná transportní cesta a parametry jako míra ředění a doba transportu jsou tak do jisté míry závislé na diskretizaci simulovaného prostoru a ovlivněné numerickou difuzí. Při dalším řešení by bylo alternativně vhodné využít hodnot vektorů na jednotlivých elementech.

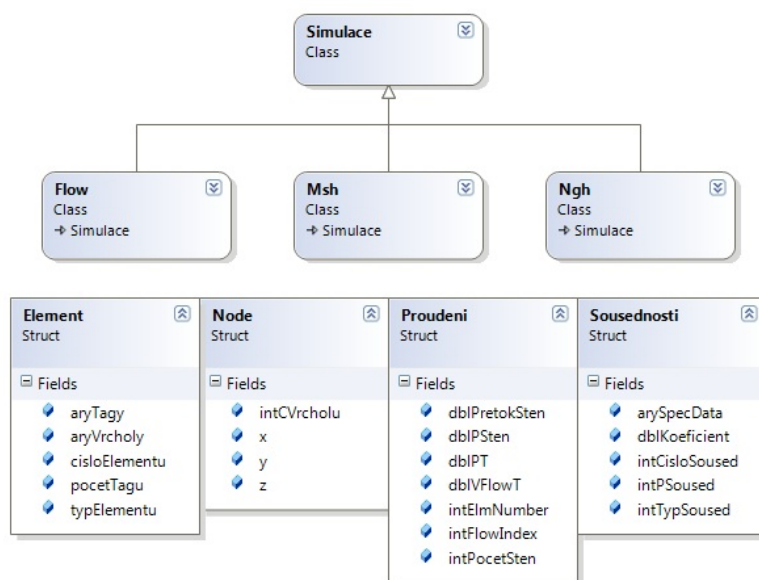


## 2 Návrh aplikace

Aplikace byla vytvořena ve vývojovém prostředí Visual studio 2008 od společnosti Microsoft, v programovacím jazyce C# a Microsoft .NET Frameworku ve verzi 3.5. Výhodou platformy .Net je, že nenutí programátora využít jeden programovací jazyk, ale dovoluje výběr z několika možností [8]. Mezi nejpoužívanější patří C#, Visual Basic .NET, C++, Delphi. Bez ohledu na použitý programovací jazyk, se aplikace vždy přeloží do mezijazyka Common Intermediate Language (CIL) [9].

### 2.1 Vnitřní struktura aplikace

Vstupní informace nutné k vyhledání transportní cesty migrace a to simulační síť, topologie sítě a údaje o proudění, přetocích přes hranice elementů jsou do aplikace načítány ve formě několika vstupních souborů rozdělených podle účelu. Soubory v aplikaci reprezentují samostatné třídy, ve které jsou datové struktury pro uložení specifických informací obsažených ve výše uvedených souborech. Společným předkem je třída Simulace, která obsahuje společné metody a atributy, které ostatní třídy dědí.



Obr. č. 13 Diagram a ukázka vnitřní struktury některých tříd

## 2.2 Výpočet transportních cest

Při výpočtu transportní cesty, jak už bylo řečeno, vycházíme z předem zadaného bodu. Tento bod je v aplikaci reprezentován elementem, v němž se daný bod nachází. Obdobně je možné zadat přímo konkrétní výchozí element. Následně po definování výchozího elementu je nutné nalézt dle typu elementu všechny sousedy. Metodika zjišťování sousedů je popsána v bodě 1.3 Postup určení směru migrace. Ze sousedností, zjištěných výše uvedenou metodikou, je vytvářen strom objektů. Struktura objektů je uvedena ve výpisu kódu.

```
public class Branch
{
    public int intElmNumber;      // číslo elementu
    public Branch[] branches;    // větve
    public Branch root;          // kořen
    public double dblOverFlow;   // přetok
    public bool blnStart;
}
```

Vyhledání cesty migrace uvedeným postupem, je možné dvěma způsoby. Jedná se o vytváření stromu prohledáváním do hloubky a do šířky. Při prohledávání do hloubky jsou následně možné dvě implementace, jedná se o implementaci se zásobníkem nebo přímou rekurzí. Byl proveden test rychlosti uvedených způsobů vytvoření stromu migrace, na výpočetní síti obsahující 1D a 2D elementy. Všechny tři přístupy vykazovaly odchylku v řádu procent. Proto je možné využít kterýkoliv z uvedených přístupů bez většího vlivu vzhledem k času zpracování. V aplikaci je implementován algoritmus prohledávání do hloubky bez rekurze, je však možné v kódu aplikace způsob kdykoliv změnit. Tato varianta výpočtu se při testování vyznačovala menší paměťovou náročností a to z důvodu nevytváření nových proměnných na haldě při rekurzivním volání.

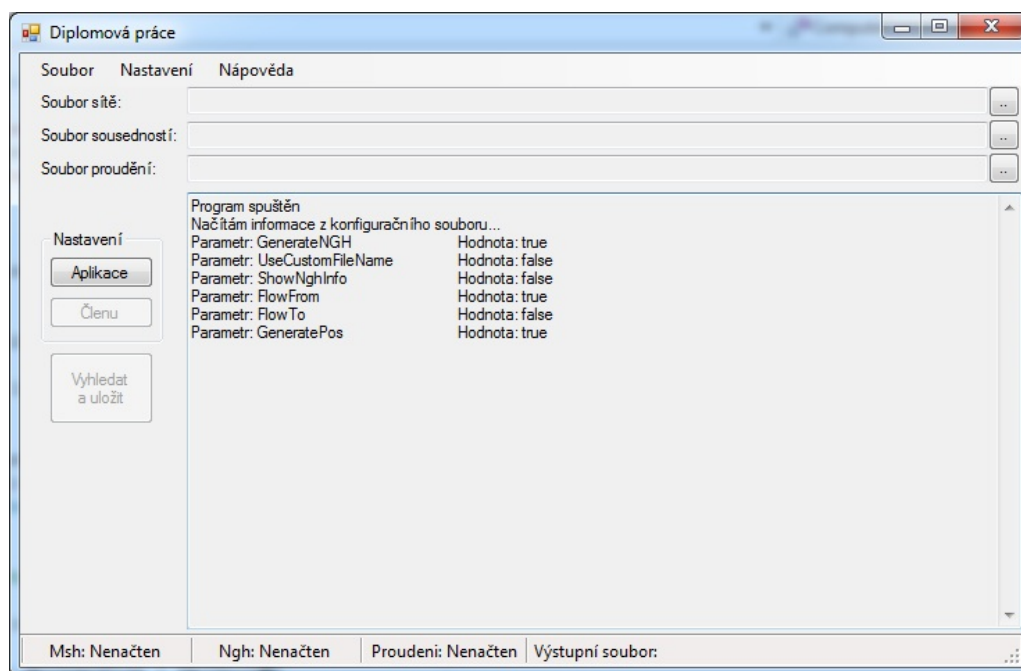
Vytváření stromu, respektive konkrétního uzlu stromu, je ukončeno, pokud je nalezen element, ze kterého nedochází k dalšímu šíření nebo jestliže dochází

k přetokům kontaminantu do elementu, pro který již uzel ve stromu existuje. Pro druhý případ je uzel vytvořen, nedojde ale k vyhledání sousedů a tím k vytváření duplicitních větví.

## 2.3 Uživatelské prostředí aplikace

Při návrhu aplikace, byly definovány základní požadavky na GUI. Tyto požadavky je možné rozdělit do dvou hlavních částí. Jedná se o požadavky na nastavení aplikace (případně nastavení parametrů výpočtů) a typu výstupního souboru a případně reprezentace vypočtených dat. Druhým požadavkem je umožnit uživateli vhodným způsobem zadat vstupní informaci o zdroji šíření kontaminantu. Navíc je vhodné uživatele informovat o zpracovávaných souborech, krocích případně i chybách, které při zpracování nastanou.

Při návrhu uživatelského rozhraní aplikace byl kladen důraz více na funkčnost před detailním a složitým grafickým vzhledem. Rozhraní proto obsahuje kombinace standardních ovládacích prvků WinForms (API). Popis a vlastnosti použitých ovládacích prvků a obecně WinForms je možné nalézt v [10].



Obr. č. 14 Hlavní pracovní formulář aplikace

Hlavní pracovní formulář vyobrazený na Obr. č. 14 obsahuje textové pole (typu TextBox), které není možné editovat a informuje uživatele o probíhajících operacích. Po dokončení všech operací aplikace zobrazí i čas a alokovanou paměť. Dále obsahuje čtyři textová pole, ve kterých jsou uvedeny cesty k vstupnímu a výstupnímu souboru. Tyto cesty je možné vybrat pouze pomocí dialogů k tomu určených a umístěných vždy vedle pole zobrazujícího cestu ke konkrétnímu souboru. Pro úplnost aplikace obsahuje v horní části formuláře i uživatelské menu s položkami pro manipulaci se soubory, jednoduchou nápovědu a informace o aplikaci. V sekci nastavení uživatelského menu jsou dostupné formuláře pro nastavení vstupního členu a parametrů výpočtů popsané níže. Tyto položky jsou také dostupné na hlavním pracovním formuláři a umožňují uživateli rychleji měnit parametry výpočtů.

**Obr. č. 15 Formulář nastavení zdrojového členu**

Formulář nastavení zdrojového členu (zobrazen na Obr. č. 15) umožňuje v aplikaci provést zadání souřadnic na osách x, y i z, nebo přímo zadáním čísla zdrojového elementu. Poslední možností je výběr elementu ze seznamu. Vzhledem k tomu, že výběr pouze dle čísla elementu by mohl být pro uživatele problémový, jsou jednotlivé elementy rozděleny podle fyzických entit. Po zadání zdrojového elementu dojde k jeho přidání do seznamu elementů určených ke zpracování. Uživatel může elementy případně i odebrat a to po zobrazení formuláře reprezentujícího uvedený

seznam. Po vytvoření seznamu, určeného ke zpracování, je nutné formulář uložit, čímž dojde i k uložení vybraných elementů.

Při využití možnosti zadání souřadnic výchozího bodu, dojde nejprve k vyhledání elementů, které zahrnují uvedený bod, případně se nachází v jeho definovaném okolí a následně je zobrazen formulář znázorněný na Obr. č. 16 který obsahuje seznam vyhovujících elementů.

Id	Cislo elementu	Typ
1	98	1D
2	99	1D
3	168	1D
4	169	1D
5	323	2D
6	325	2D
7	18259	2D
8	18260	2D
9	18425	2D
10	18427	2D
11	19867	2D
12	19868	2D

Elementy typu:

☒ 1D  
☒ 2D  
☒ 3D

Zrušit Přidat

Obr. č. 16 Formulář výběru elementů při zadání souřadnicbodu

Tento formulář umožňuje vybrat jeden nebo více elementů a přidat je do seznamu ke zpracování. Uživatel může pro lepší přehlednost filtrovat elementy podle dimenze. Obdobný formulář sloužící ale ke správě seznamu elementů je zobrazen na Obr. č 17.

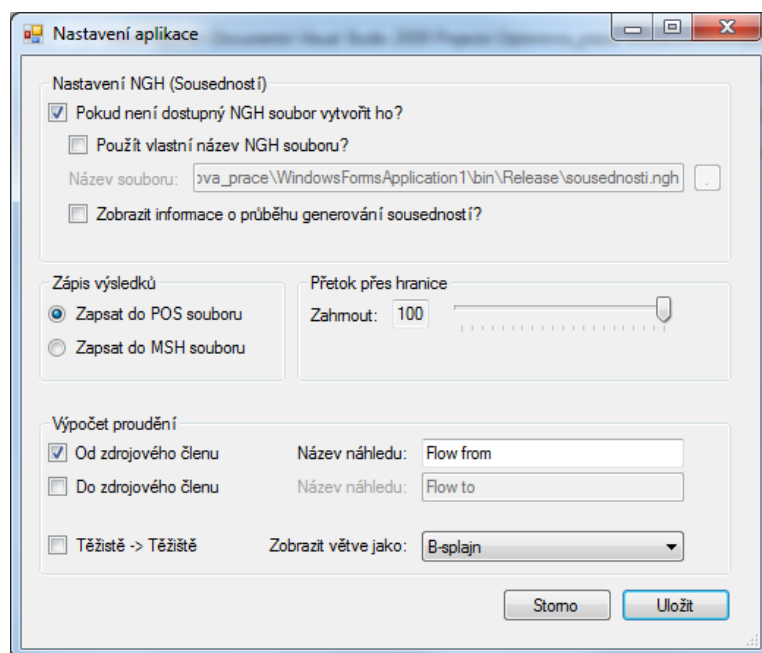
Id	Cislo elementu	T	2.749999999999998	0.74999999999999802	0
1	4	T: 2.749999999999998	0.74999999999999802	0	0
2	13	T: 3.39285714285643	1.39285714285643	0	0
3	93	T: 9.10714285714192	7.10714285714192	0	0
4	204	T: 2.35158324870886	0.295574335812049	0	0
5	6226	T: 5.46752296739798	0.638358523988531	0	0

Odstranit  
Odst. vše  
Ukončit

Obr. č. 17 Formulář správy seznamu elementů ke zpracování

Na rozdíl od předchozího formuláře je zde navíc uvedeno těžiště daného elementu tak, aby uživatel měl představu o umístění elementu.

Aplikace umožňuje výpočet transportních cest migrace směrem ze zdrojového členu, ale také směrem do zdrojového členu. Principiálně se jedná o analogické operace, kdy se vyhledávají opačné směry šíření. Uživatel ovlivňuje nastavení těchto parametrů dvěma ovládacími komponentami a to CheckBox a TextBox. První jmenovaná komponenta nastavuje, zda bude uvedený výpočet proveden. Druhá umožňuje uživateli zadat název náhledu daného směr migrace. Ovládací prvky jsou ve formuláři nastavení aplikace uvedeny dvakrát, pro směr do a ze zdrojového elementu.



Obr. č. 18 Nastavení aplikace a výpočtů

Dalším ovládacím prvkem, který ovlivňuje vytváření cesty migrace, je komponenta TrackBar. Změnou parametrů této komponenty, která má rozsah od 0 do 100, dochází ke změně procentní odchylky od hlavní migrační cesty. To znamená, že při nastavení hodnoty na nulu, dojde k vyhledání pouze hlavní migrační cesty. Při nastavení hodnoty na 100%, jsou vyhledány všechny cesty migrace. Implicitní hodnota prvku je nastavena na 0%.

Výsledky aplikace je možné ukládat do dvou typů souboru a to MSH a POS. Uživateli je umožněna volba prostřednictvím dvou komponent typu RadioButton

sdružených komponentou GroupBox a umožňujících volbu vždy pouze jednoho z formátů. Vzhledem k tomu, že pro generování NGH souboru je využívána samostatná konzolová aplikace, do aplikace byla integrována možnost vygenerování tohoto souboru. Přesto je doporučeno načítat NGH soubor, který byl využit jako vstupní soubor simulace.

### 3 Testovací úlohy

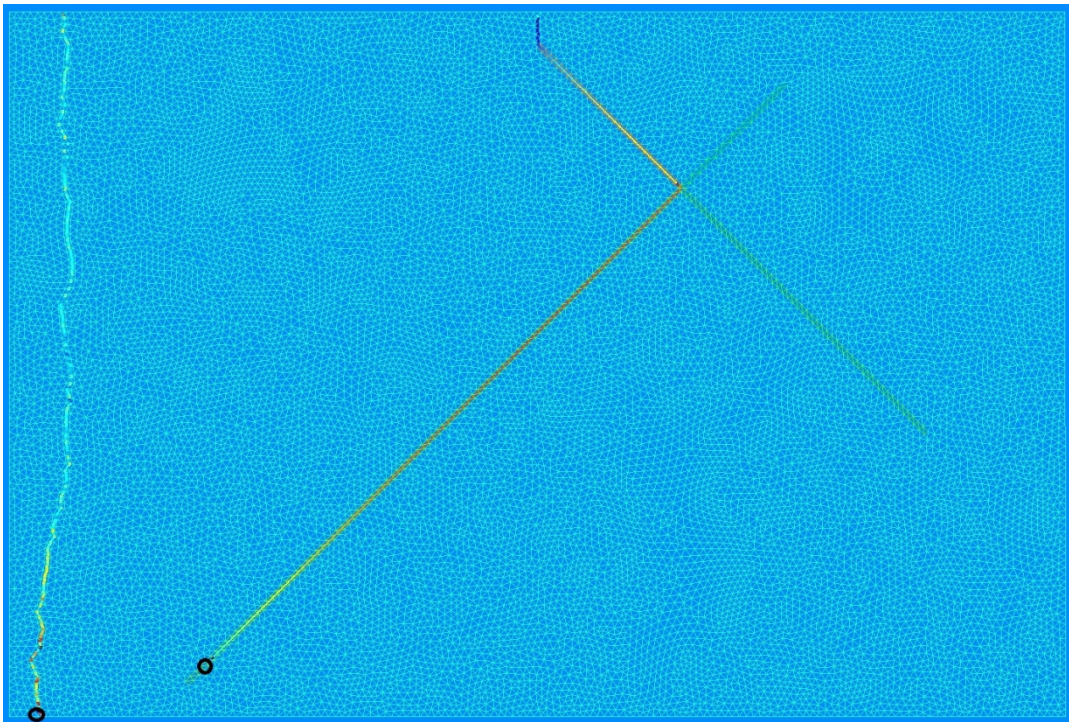
Vývoj a testování výsledné aplikace probíhalo převážně na dvou uměle vytvořených úlohách a na závěr i jedné reálné úloze oblasti Melechovského masivu. V první fázi probíhalo testování na příkladu, jehož výpočetní síť je složena pouze z 2D elementů tj. trojúhelníkových elementů. Puklina, nacházející se v oblasti je zde tudíž reprezentována také 2D elementy. Tato síť představuje mezi testovanými úlohami nejjednodušší variantu, nezahrnuje totiž sousednosti mezi elementy různých dimenzí. Dále byla k testování použita síť řešící obdobnou situaci, pouze pukliny nacházející se v dané úloze nejsou reprezentovány 2D elementy, ale 1D elementy neboli úsečkami. Na závěr proběhlo testování na reálné úloze Melechovského masivu. Tato výpočetní síť obsahuje kombinaci 2D a 3D elementů tedy trojúhelníků a čtyřstěnů.

#### 3.1 Varianty zobrazení výsledků

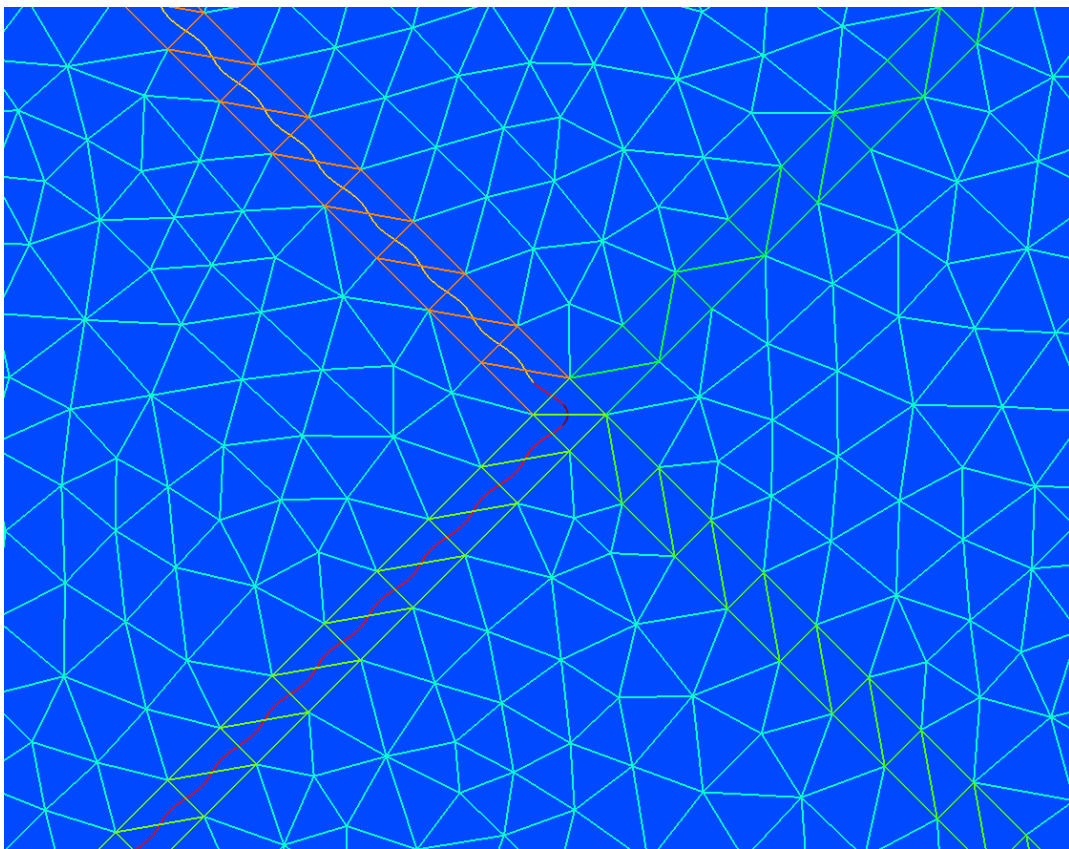
Implementovaná aplikace umožňuje několik variant reprezentace výsledků a nastavení odchylky od hlavního směru v procentech. Výsledky, jak je uvedeno v předchozí kapitole, je možné uložit zhruba třemi hlavními způsoby. Jedná se o aproximovanou křivku, vektor směru přetoku na stěně případně výsledný vektor rychlosti proudění. Vzhledem k tomu že testování probíhalo nejprve na čistě 2D síti, bude na této síti prezentováno základní nastavení aplikace a vliv případné aproximace na zobrazený výsledek.

V této části jsou výsledky prezentovány vždy pro stejný zdrojový element, pouze je použita jiná reprezentace výsledných dat. Prvním prezentovaným výsledkem jsou výpočty pro zdrojové elementy č. 104 a č. 1166 za použití B-spline křivky a vyhledání pouze hlavního směru migrace. Této varianty lze využít, pokud hledáme pouze jeden směr šíření například chemické látky do okolí, nebo obdobné varianty docílíme, jestliže se v oblasti nalézá dominantní puklina, která má výrazně odlišné vlastnosti od okolí.



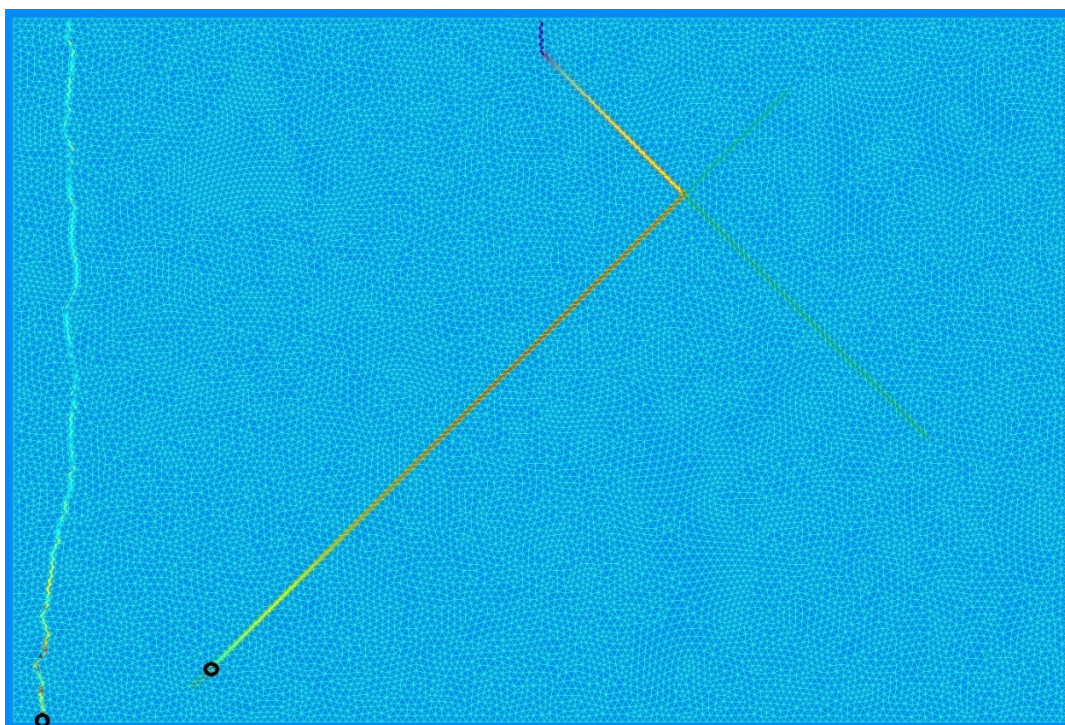


Obr. č. 19 Globální pohled na 2D úlohu s využitím aproximace



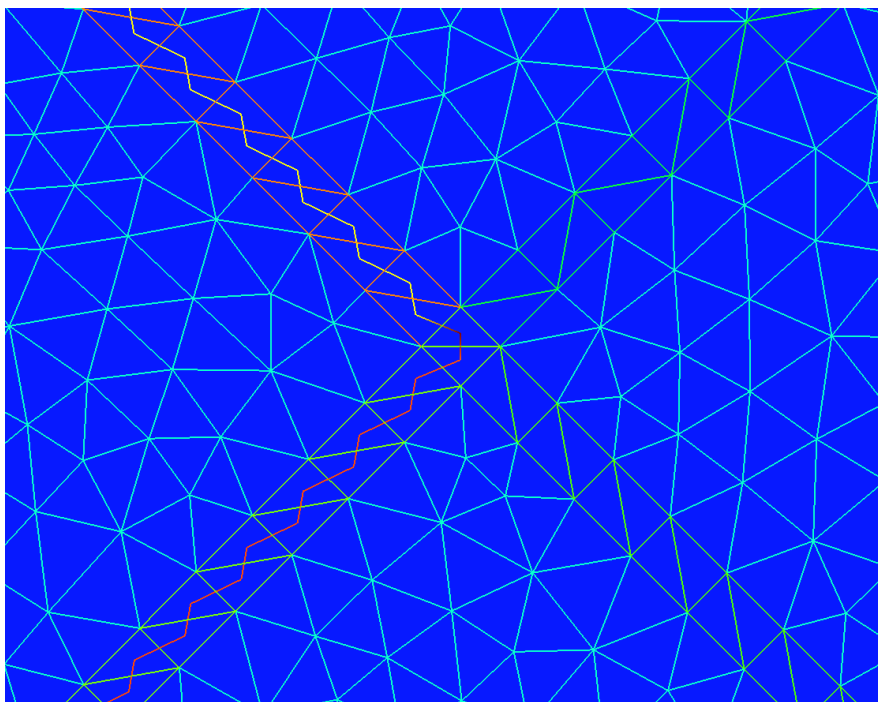
Obr. č. 20 Bližší pohled na 2D úlohu s využitím aproximace

Na Obr. č. 19 a č. 20 je znázorněn pouze hlavní směr migrace a využití aproximace pomocí B-spline křivky. Obzvláště na Obr. č. 20 je dobře znázorněna aproximace při šíření přes trojúhelníkové elementy výpočetní sítě. Dochází k částečné kompenzaci vlivu diskretizace oblasti a vytvoření oblouku v místě kontaktu čtyř elementů puklin. Pro porovnání je na Obr č. 21 a Obr č. 22 vyobrazena stejná situace, pouze znázorněna pomocí úseček.



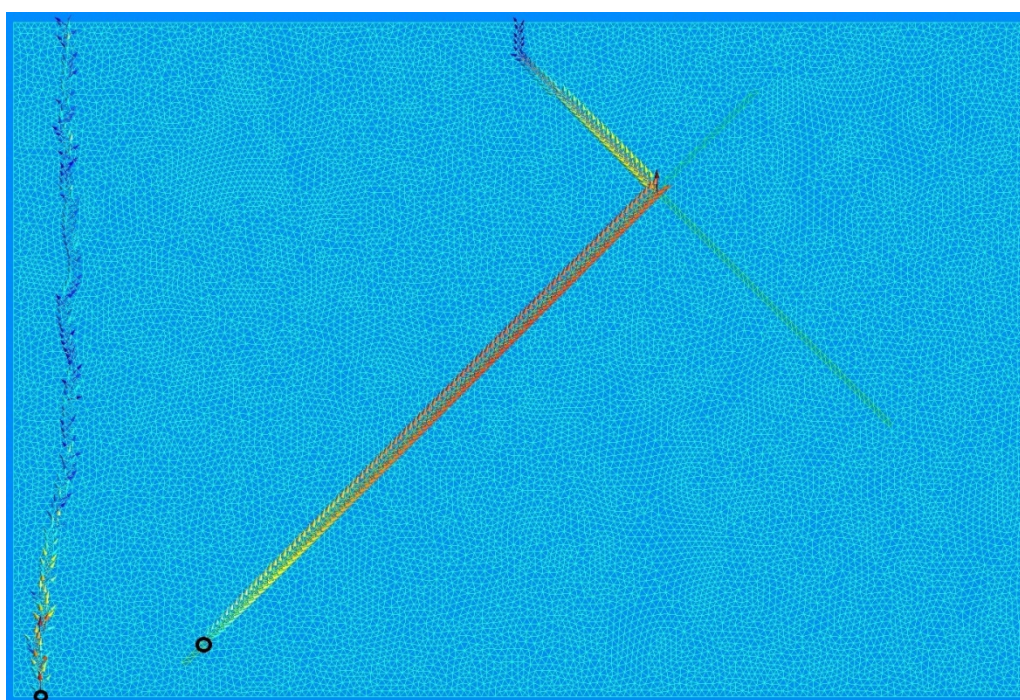
Obr. č. 21 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí úseček



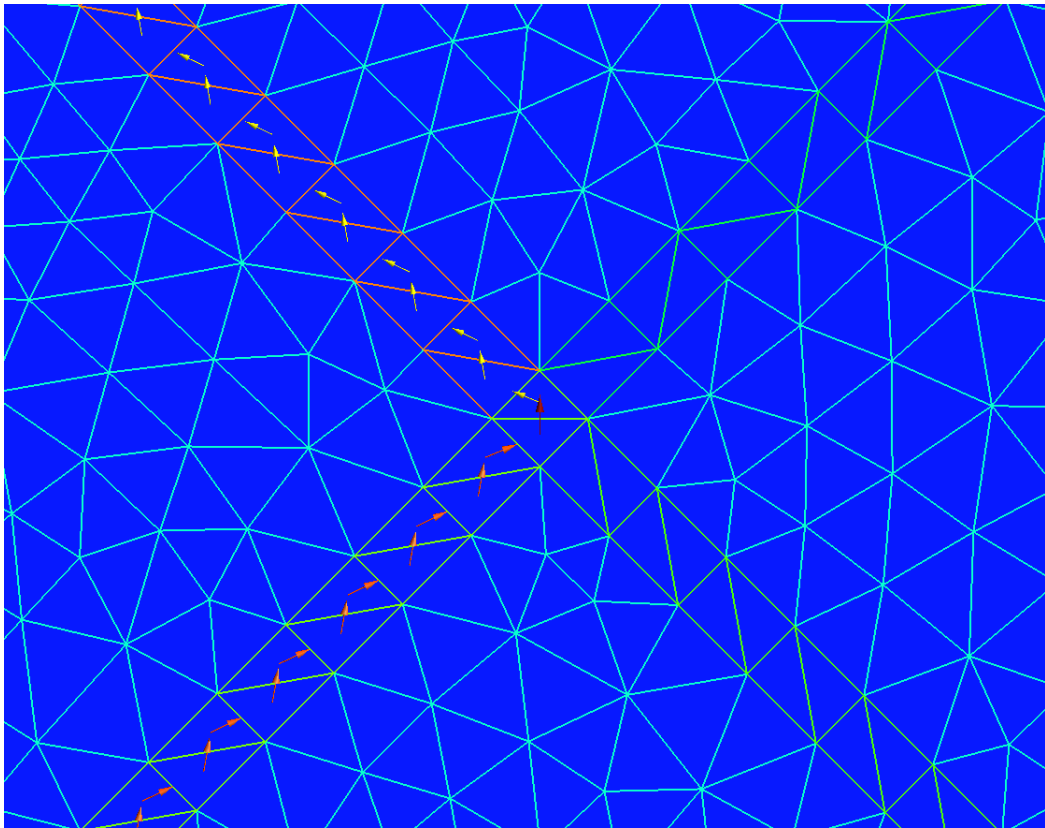


Obr. č. 22 Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí úseček

Třetí možností, jak si zobrazit výsledky nalezených migračních cest, je zobrazení vektoru přetoku z těžiště zdrojového, do těžiště cílového elementu, kde délka vektoru odpovídá přetoku dané stěny směrem k elementu, se kterým stěna sousedí. Tato situace je znázorněna na obrázku č. 23 a č. 24.



Obr. č. 23 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazením pomocí vektoru přetoku

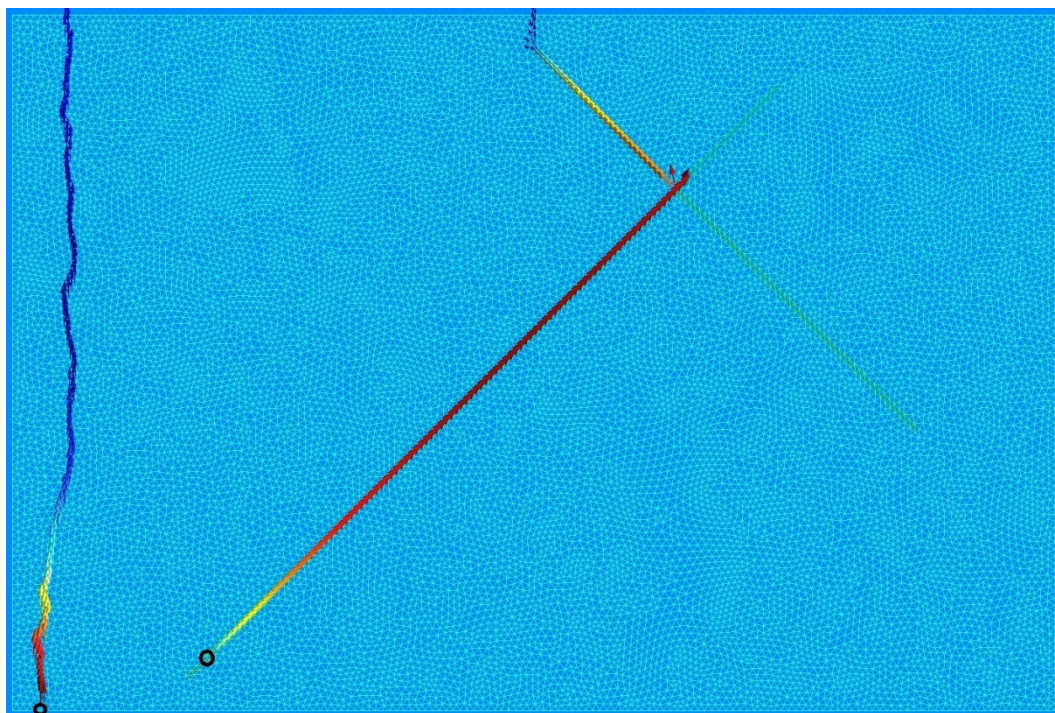


**Obr. č. 24** Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vektoru přetoku

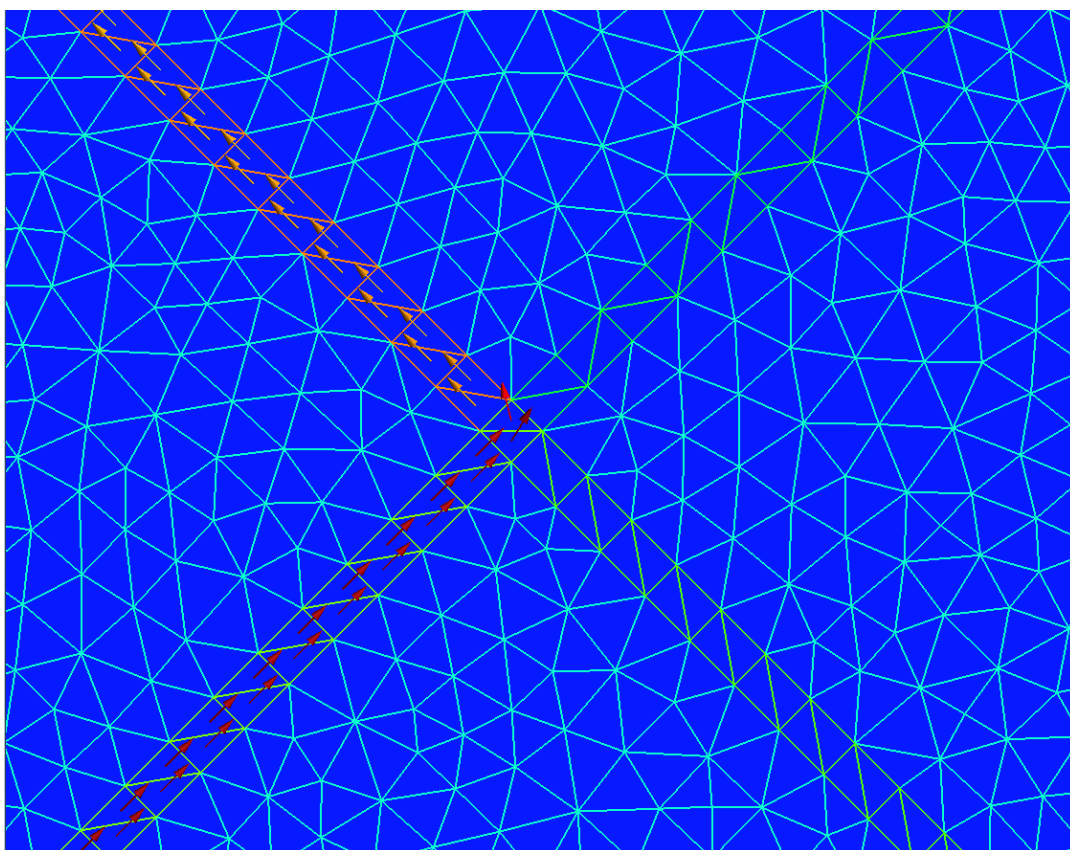
Tato varianta zobrazení byla využívána převážně při testování správnosti vypočtených výsledků. Její jednoznačná výhoda spočívá ve snadnosti vizuální identifikace směru šíření mezi jednotlivými elementy a tudíž dobré kontroly s pouze numerickými výsledky simulace (přetoky přes stěny). Naopak její nevýhoda je v první řadě ve vzniku vektorů, směřujících na sousední elementy a ne přímo ve směru migrace, dále pak nezobrazování posledního vektoru směřujícího mimo modelovanou síť. Tento vektor by bylo možné zobrazit, například pokud by směřoval kolmo na hranu simulované oblasti. Tato možnost ale nebyla v implementované aplikaci využita.

Čtvrtá varianta zobrazení využívá k reprezentaci směru postupu kontaminantu, vektor rychlosti proudění uložený ve výsledcích proudění.





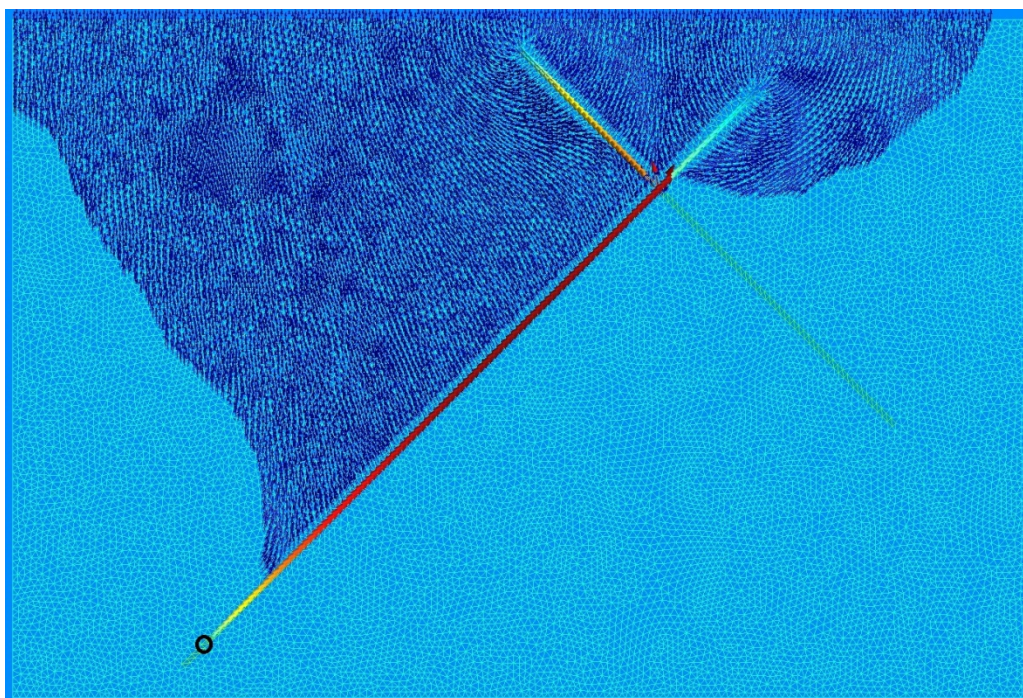
Obr. č. 25 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vekt. rychlosti proudění



Obr. č. 26 Bližší pohled na 2D úlohu a zobrazení pomocí vektoru rychlosti proudění

Výhoda této varianty spočívá v zobrazení odpovídajícího směru proudění v daném místě (elementu), tudíž výsledný vektor nejvěrohodněji reprezentuje výsledky výpočtu ustáleného proudění.

Předchozí situace znázorňovali několik variant prezentace výsledků pouze na vyhledané preferenční cestě. Na Obr. č. 27 je znázorněn výsledek výpočtu směru migrace pro vyhledání všech směrů migrace ze zdrojového elementu č. 104 a zapsání výsledků ve formě vektoru rychlosti proudění.

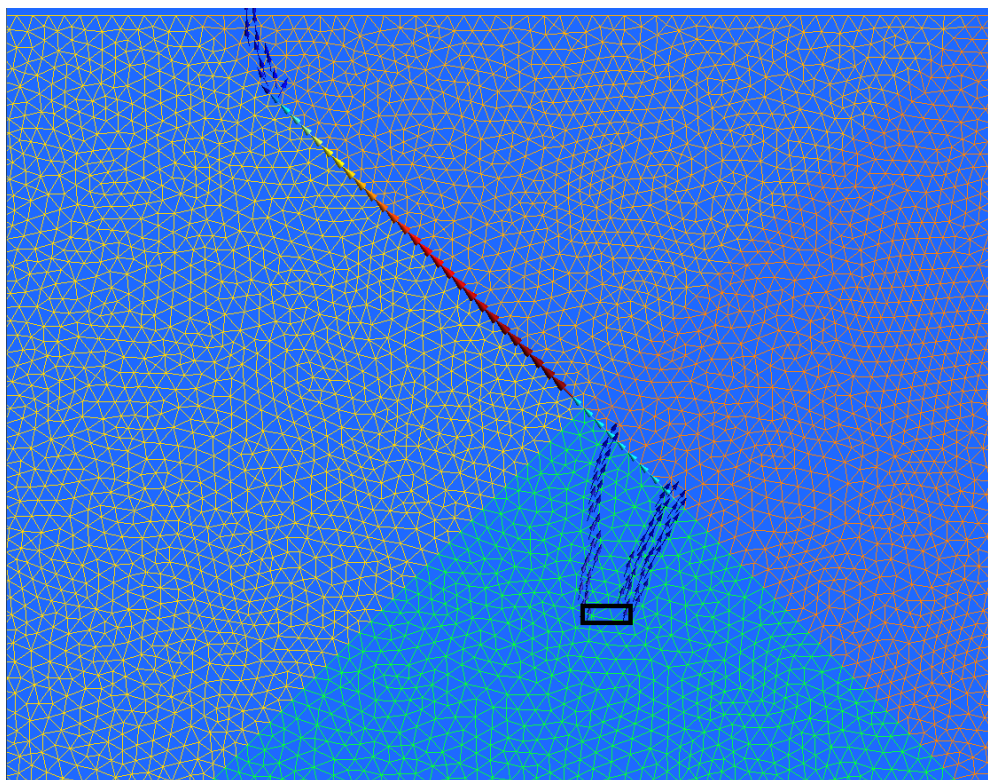


Obr. č. 27 Globální pohled na 2D úlohu a zobrazení všech směrů migrace

### 3.2 Praktická ukázka nasazení

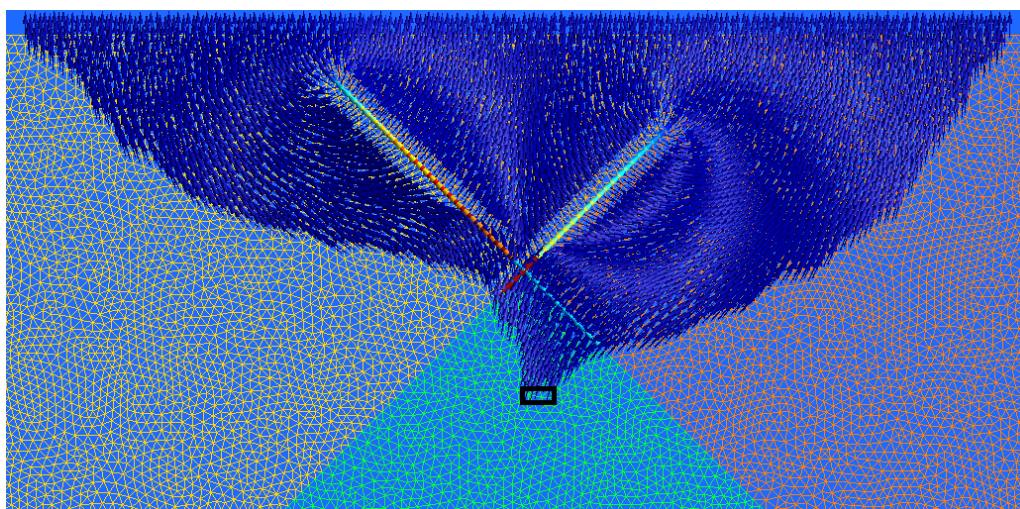
Vyhledání všech směrů šíření ze zdrojového elementu může být přínosné v situacích, kdy je potřeba vyhledat oblast, která bude zasažena kontaminantem. Ukázkovým příkladem může být chemická továrna, šířící do okolí nebezpečné látky. Chceme-li, znát směry šíření v definované oblasti určíme několik hlavních bodů a z těchto bodů vyhledáme směry šíření. Na Obr. č. 28 je zdrojová oblast definována červeným obdélníkem.





Obr. č. 28 2D síť s oblastí kontaminace a zobrazenými preferenčními cestami

Směr proudění ze všech čtyř vstupních elementů se sdružuje v puklině procházející z pravé části sítě do levého rohu. Tvoří hlavní transportní kanál a dá se předpokládat, že tato oblast bude při kontaminaci, z námi definovaného zdroje, zasažena jako první.

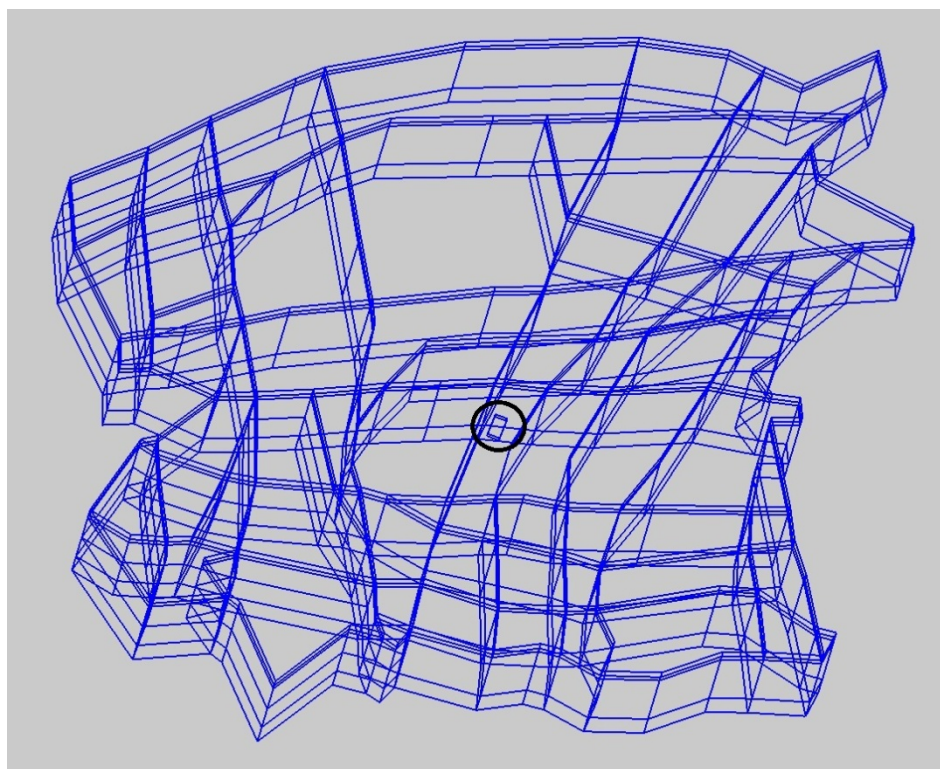


Obr. č. 29 2D síť s oblastí kontaminace a zobrazenými všemi cestami migrace

Opačná situace je znázorněna na Obr. č. 29, kde ze zdrojové oblasti dochází k šíření kontaminantu nejen hlavním směrem, ale dle nastavení všemi směry. Zasažená oblast je, oproti předchozí variantě, mnohonásobně rozsáhlejší. Celá tato oblast by byla za určitý čas kontaminována. Této varianty výsledku je možné využít například pro definici prostoru k bližší analýze po havárii, nebo jako podklad pro vypracování nouzových plánů.

### 3.3 Reálná úloha Melechovského masivu

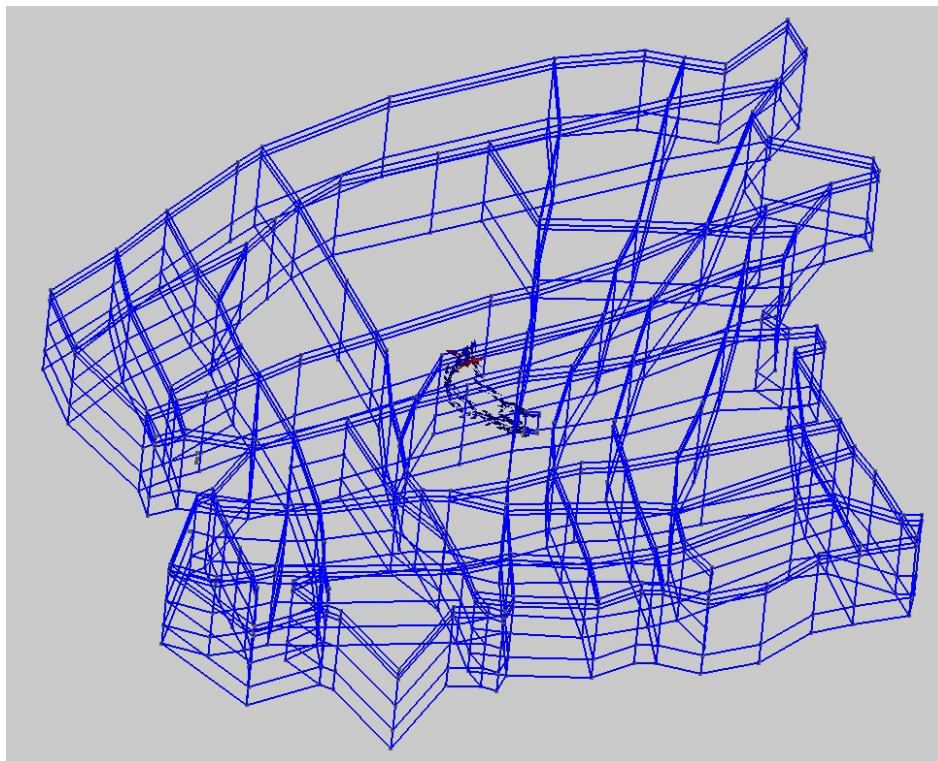
Melechovský masiv se nachází zhruba uprostřed pomyslného trojúhelníku měst Světlá nad Sázavou, Ledeč a Humpolec na rozloze přibližně 67 km<sup>2</sup>. Kóta dominantního vrcholu Melechov se nalézá zhruba ve výšce 708 m a je součástí Českomoravské vrchoviny. Vzhledem ke komplikovanosti prezentování rozsáhlejších 3D úloh, je k ukázkám místo simulační sítě využita geometrie oblasti. Je tím dosaženo větší přehlednosti a lepší orientace. Na obr. č 30 je znázorněna geometrie oblasti Melechovského masivu. Je zde vyznačeno teoretické umístění zdroje kontaminantu, reprezentované objektem ve tvaru kvádru označeného černým oválem.



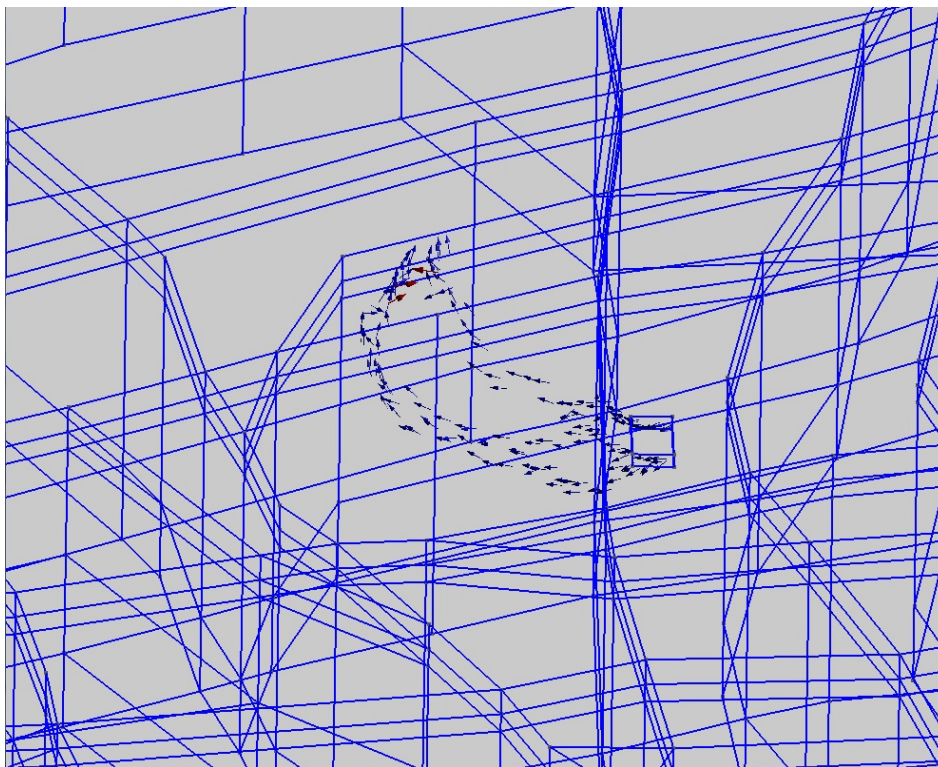
Obr. č. 30 Geometrie oblasti Melechov masivu s vyznačeným zdrojem kontaminantu



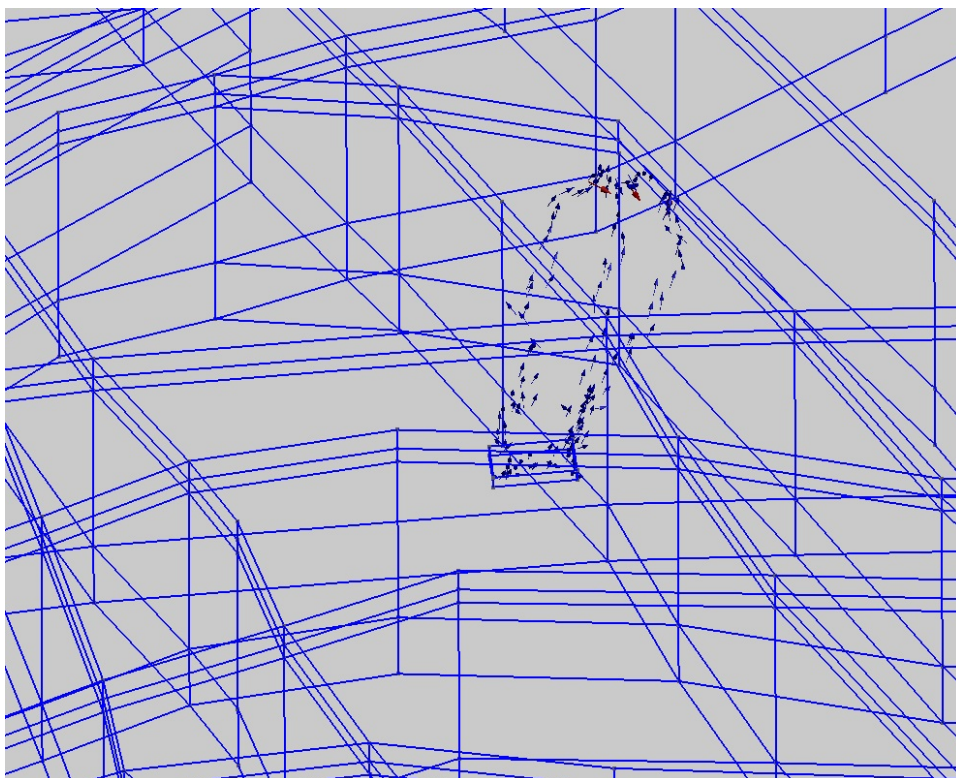
Prvním z prezentovaných výsledků je výpočet hlavních migračních cest čtyř elementů zvolených tak, aby reprezentovaly krajní stěny hypotetického zdroje kontaminantu.



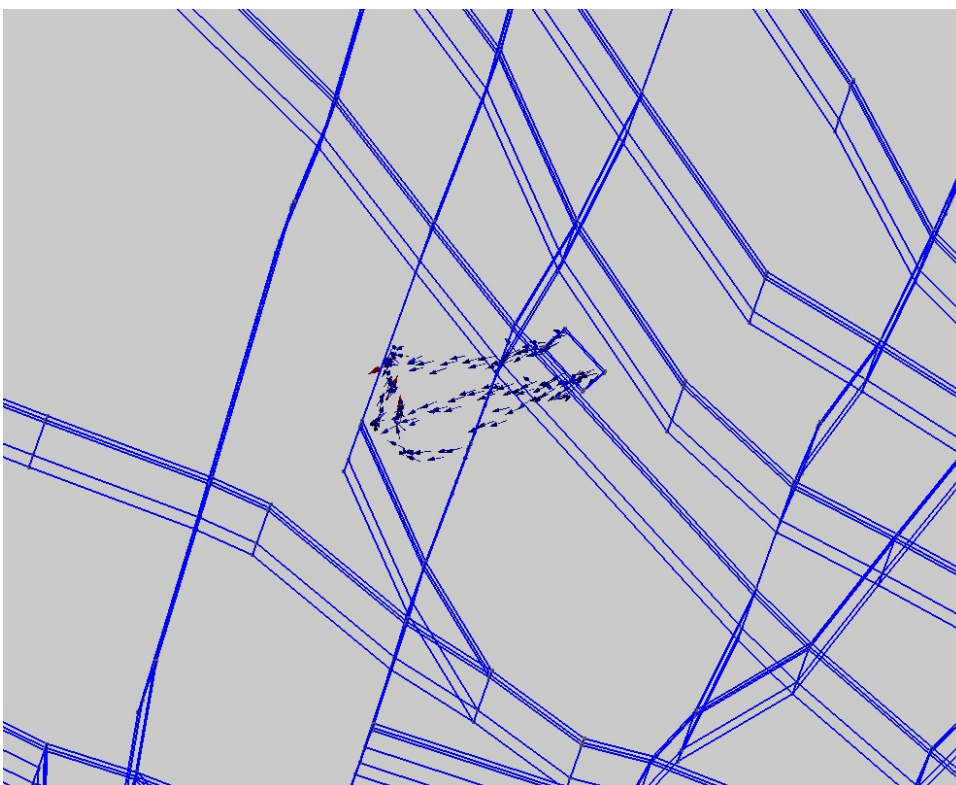
**Obr. č. 31 Globální pohled na první variantu Melechovského masivu**



**Obr. č. 32 První detail na první úlohu Melechovského masivu**



**Obr. č. 33 Druhý detail na první úlohu Melechovského masivy**

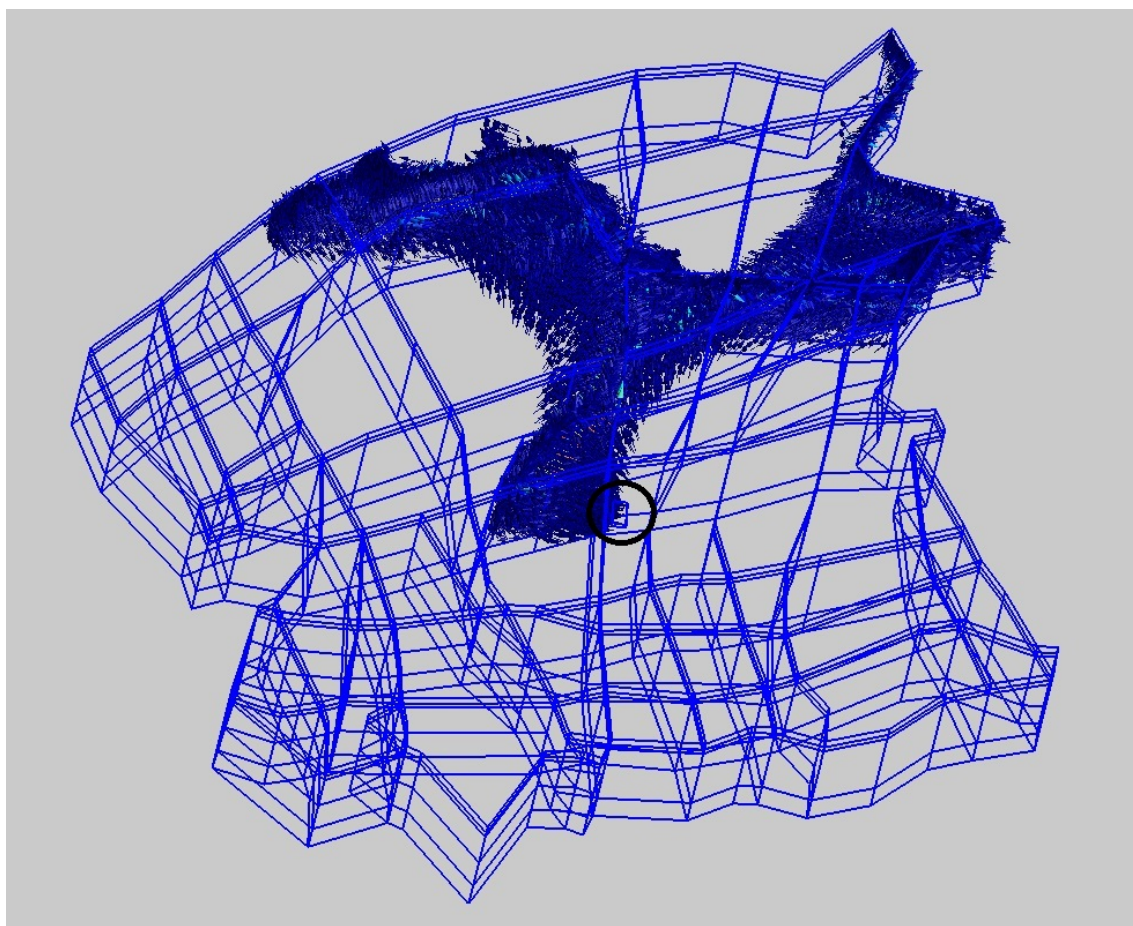


**Obr. č. 34 Třetí detail na úlohu Melechovského masivy**



Nejprve je na Obr. č. 31 zobrazen globální pohled na celou simulovanou oblast. Hlavní směry šíření postupují až na malé odchylky přibližně stejným směrem. Ačkoliv to na ilustracích není příliš patrné, z elementu číslo 12273 dojde nejdříve k výraznému poklesu a poté pozvolnému stoupání na úroveň zbylých tří migračních cest. Pravděpodobný je vedlejší vliv, který na ostatní cesty nepůsobí a mohlo by se jednat o zajímavý podnět pro další analýzu. Transportní cesty ve směru ke hranici fyzického objemu postupně začínají směřovat do povrchové vrstvy. V této vrstvě následně dojde k částečnému sjednocení a ukončení cest na povrchu oblasti.

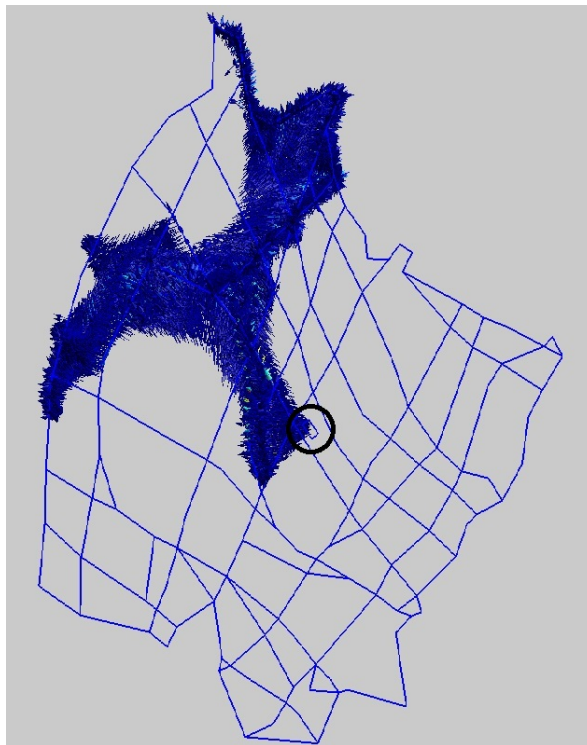
Druhým zde popsaným výstupem, je výpočet transportní cesty pro všechny ovlivněné elementy. Tuto situaci znázorňuje Obr. č. 35.



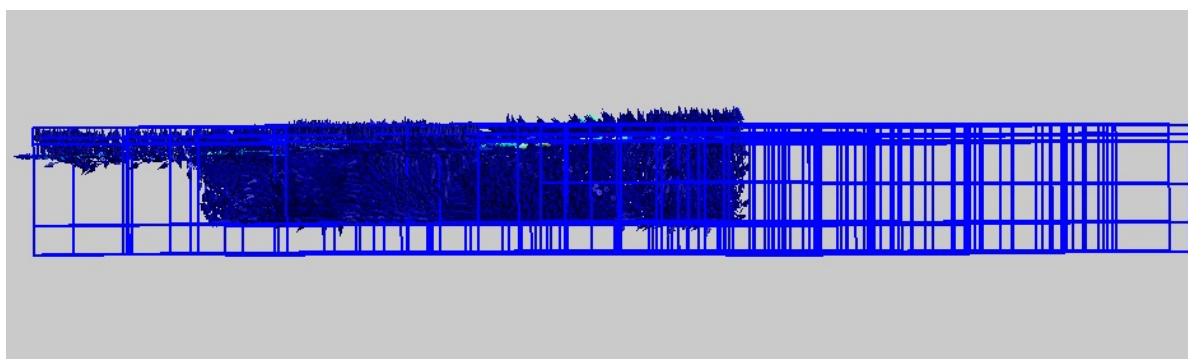
Obr. č. 35 Migrační cesta z uvažovaného zdroje kontaminantu pro element 12273

Zde můžeme nalézt oblast, která bude v určitém časovém horizontu ovlivněna námi sledovanou látkou šířící se z hypotetického zdroje kontaminantu. Jak je vidět, nemusí se ani zdaleka jednat o většinovou část simulované oblasti. Chování proudění v oblasti

ovlivňují různé vlivy od puklinových systémů až po studny, lomy a například i průzkumné vrty. Pro úplnost a lepší orientaci je na Obr. č. 36 a 47 znázorněny půdorys a bokorys simulované oblasti.



**Obr. č. 36 Půdorys úplné cesty šíření z uvažovaného zdroje kontaminantu**



**Obr. č. 37 Bokorys úplné transportní cesty z uvažovaného zdroje kontaminantu**

Při výpočtu migrační cesty u takto rozsáhlých oblastí a obzvláště u kompletní migrační cesty se u aplikace projevuje výpočetní náročnost. Ta se projevuje zhoršenou, nebo v podstatě nulovou reakcí na podněty uživatele. To je způsobeno prováděním výpočtu v hlavním vlákně aplikace.

## Závěr

Cílem práce bylo navrhnout a implementovat počítačovou aplikaci, která zpracuje výsledky poskytnuté simulačním softwarem Flow123D a dle zadaných parametrů provede vyhledání transportní cesty. V průběhu řešení bylo nejprve nutné analyzovat dostupné informace a s ohledem na získané informace následně navrhnout požadovanou aplikaci.

Práce se nejdříve věnuje analýze problematiky, která je psána jako stručný úvod s ohledem na využití dostupných dat k požadovanému zpracování. Zde bylo zjištěno, že při zobrazení výsledků pomocí lomené čáry tj. spojnicí těžišť elementů cesty, je ne vždy dosaženo cíleného výsledku plynulého náhledu na cestu. Zkreslení je dáno stupněm diskretizace a typy elementů, jejichž těžiště jsou spojována. Tato vlastnost, vedla k rozhodnutí o implementaci aproximaci vzniklé cesty. Po konzultaci s vedoucí práce bylo rozhodnuto o využití Coonsovy kubiky třetího řádu, respektive takzvaného uniformního kubického B-spline, který vzniká navázáním Coonsových kubik. Aplikováním uvedeného postupu vznikne plynulá spojnice mezi počátečními a koncovými body transportní cesty.

V průběhu analýzy vyplynulo, že je možné z dat generovaných podel transportní cesty získat další účelné informace. Implementovány jsou dva parametry hlavní migrační cesty a to transportní čas a ředění. Při výpočtu obou parametrů, nejsou zahrnuty všechny vlivy, proto se jedná o orientační hodnoty. Jednotlivé vlivy na tyto parametry jsou zde podrobně popsány.

Práce se následně věnuje vlastní implementaci aplikace. Zde je stručně popsána vnitřní struktura aplikace, vyhledávání transportních cest spolu s grafickým uživatelským rozhraním. Uživatelské rozhraní tvoří hlavní spojnicí mezi uživatelem a jádrem aplikace, proto bylo tvořeno tak, aby bylo intuitivní, přehledné s minimem ovládacích prvků a několika informačními komponentami. Tyto prvky uživatele informují o aktuálně probíhajících operacích a zobrazují uživateli informace, jaké vstupní soubory jsou právě zpracovávány.

Výsledky, které aplikace poskytuje, bylo nutné během celého vývoje průběžně ověřovat jak numericky, tak i graficky pomocí aplikace GMSH. K tomu sloužilo několik modelových úloh a jedna reálná úloha Melechovského masivu. Několik takto

vzniklých výsledků je prezentováno ve třetí části, kde je také prezentováno jedno z potenciálních nasazení vytvořené aplikace.

Ačkoliv aplikace nabízí rozličné množství způsobu zobrazení vyhledaných cest, do budoucna by bylo možné rozšířit možnosti o další formáty. Vzhledem k neustálému vývoji simulačního softwaru Flow123D se dá očekávat testování další formátů, jako je například aktuálně testovaný VTU. Dále by bylo zajímavé analyzovat možnost paralelního zpracování a v případě pozitivního výsledku využít některé implementace obsažené v .NET Framework. Potenciálně zajímavá může být i možnost implementování přímého zobrazování v navržené aplikaci, tak aby nebylo nutné využívat aplikace třetích stran. Pokud by došlo k požadavku ze strany uživatelů, na výpočet ředění nejen pro hlavní migrační cestu, bylo by také možné podrobit tento problém hlubší analýze a případně i tuto funkci do aplikace implementovat.

## Literatura

- [1] SEVERÝN, Otto a kol., 2008, *Flow123D: numerical simulation software for flow and solute transport problems on combination of fracture network and continuum: documentation of file formats and brief user manual*, [online], [akt. 20. 11. 2008], [cit. 24. 9. 2011], Dostupné z: <http://www.nti.tul.cz/cz/images/2/2a/Flow123d-manual.pdf>.
- [2] MARYŠKA, Jiří a Výzkumné centrum Pokročilé sanační technologie a procesy, 2010, *Modelování transportních procesů v horninovém prostředí (Technická univerzita v Liberci)*.
- [3] GEUZAINÉ, Christophe a REMACLE, Jean-Francois, 2010, *Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities documentation*, [online], [akt. 16. 10. 2010], [cit. 24. 9. 2011], Dostupné z: <http://www.geuz.org/gmsh/#Documentation>.
- [4] PLÍVA, Zdeněk, a Jindra DRÁBKOVÁ, 2009, *Metodika zpracování diplomových, bakalářských a vědeckých prací na FM TUL*. Liberec: TUL. Dostupné z: [https://www.ite.tul.cz/ite/images/data/edu/jak\\_psat\\_dp.pdf](https://www.ite.tul.cz/ite/images/data/edu/jak_psat_dp.pdf).
- [5] SOCHOR, J., ŽÁRA, Jiří, BENEŠ, B., 1996, *Algoritmy počítačové grafiky VŠ skripta*, Praha: ČVUT, Dostupné z: <http://herakles.zcu.cz/~skala/EDU-PUB/APG-1-OCR.pdf>
- [6] ŽÁRA, Jiří a kol., 1992, *Počítačová grafika - principy a algoritmy*, Praha: Grada, ISBN: 80-85623-00-5
- [7] ŘÍHA, Jakub, 2010, *Simulace zásaku a šíření železných nanočástic*, diplomová práce (Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technická univerzita v Liberci)
- [8] EVJEN, Bill a kol., 2009, *C# Programujeme profesionálně*, Brno: Computer press, ISBN: 978-80-251-2401-7
- [9] PETZOLD, Charles, 2006, *Programování Microsoft Windows Forms v jazyce C#*, Brno: Computer press, ISBN: 80-251-1058-3
- [10] WATSON, Karli a kol., 2008, *Beginning Microsoft Visual C# 200*, USA: Wiley Publishing Inc., ISBN: 978-0-470-19135-4

## **Příloha A   Obsah přiloženého disku**

Na přiloženém kompaktním disku, který je přiložen k diplomové práci, je možné nalézt aplikaci pro výpočet transportních cest migrace ve spustitelné formě a její zdrojové kódy. Dále je přiložen instalátor platformy .NET Framework, který obsahuje běhové prostředí CLR, které zajišťuje běh vytvořené aplikace. Přiložený disk také obsahuje kompletní text diplomové práce. Disk obsahuje následující adresářovou strukturu:

- Spustitelná aplikace - obsahuje aplikaci ve spustitelné podobě, není nutná instalace
- Další software - obsahuje instalátor .NET Framework
- Zdrojové kódy – obsahuje zdrojové kódy aplikace, připravené ke kompilaci
- Dokumentace – Obsahuje text diplomové práce